

Dipl.-Ing. Tobias Mente

**Numerische Simulation der  
wasserstoffunterstützten Rissbildung in  
austenitisch-ferritischen Duplexstählen**

Die vorliegende Arbeit entstand an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung.

Impressum

**Numerische Simulation der  
wasserstoffunterstützten Rissbildung in  
austenitisch-ferritischen Duplexstählen**

2015

Herausgeber:

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Unter den Eichen 87

12205 Berlin

Telefon: +49 30 8104-0

Telefax: +49 30 8112029

E-Mail: [info@bam.de](mailto:info@bam.de)

Internet: [www.bam.de](http://www.bam.de)

Copyright © 2015 by

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Layout: BAM-Referat Z.8

ISSN 1613-4249

ISBN 978-3-9816668-9-2

# **Numerische Simulation der wasserstoffunterstützten Rissbildung in austenitisch-ferritischen Duplexstählen**

**Dissertation**

zur Erlangung des akademischen Grades

**Doktoringenieur**

**(Dr.-Ing.)**

von Dipl.-Ing. Tobias Mente

geb. am 26. Januar 1983 in Halberstadt

genehmigt durch die Fakultät für Maschinenbau  
der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Thomas Böllinghaus

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Peter Mayr

Promotionskolloquium am 03. November 2014



*Gewidmet meinen Großvätern Otto und Erich sowie meiner Großtante Annemarie, die mich stets motiviert und unterstützt haben, den Abschluss der Arbeit aber leider nicht miterleben durften.*



## Zusammenfassung

In der Offshore-Industrie werden seit langer Zeit austenitisch-ferritische Duplexstähle eingesetzt, da sie im Vergleich zu herkömmlichen austenitischen hochlegierten Stählen bessere Festigkeitseigenschaften aufweisen und gegenüber rein ferritischen hochlegierten Stählen eine bessere Verformbarkeit bei gleichzeitig verbesserter Korrosionsbeständigkeit, auch in aggressiver Umgebung, bieten. Dennoch zeigt das Schrifttum, dass es trotz dieser guten Eigenschaften zum Versagen von Bauteilen kommen kann, bei dem Wasserstoff für die Schadensursache eine entscheidende Rolle spielt.

Zur Klärung der Schädigungsmechanismen unter Einfluss von Wasserstoff kann die numerische Simulation einen entscheidenden Beitrag leisten, da sich experimentelle Ergebnisse besser deuten und zwischen Labortests bis hin zu Bauteilversuchen übertragen lassen. Bisher wurden jedoch meistens makroskopische numerische Betrachtungen zur wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen durchgeführt. Die Duplexstähle bestehen jedoch nahezu aus gleichen Teilen an austenitischer und ferritischer Phase, welche unterschiedliche mechanische Eigenschaften als auch Transporteigenschaften für Wasserstoff aufweisen. Zugleich bedingt dies eine unterschiedliche Empfindlichkeit für eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung. Daher bestand die Aufgabe dieser Arbeit in der Erstellung eines numerischen Mesomodells eines realen Duplexgefüges, mit dem die Abbildung des Wasserstofftransportverhaltens, der mechanischen Spannungen und Dehnungen sowie der Rissinitiation und des Rissfortschrittes in den einzelnen Phasen möglich ist. Zudem werden moderne Röntgenbeugungsexperimente genutzt, um den Einfluss von Wasserstoff auf die phasenspezifischen mechanischen Eigenschaften zu bestimmen.

Für den Transport von Wasserstoff konnte eine deutliche Abhängigkeit von der Orientierung der austenitischen und ferritischen Phase im Gefüge gezeigt werden, wobei der Wasserstofftransport vornehmlich über die ferritische Phase erfolgt und der Wasserstoff im Austenit stärker getrappt wird. Die numerische Analyse der mechanischen Spannungen und Dehnungen in den Phasen des Duplexstahls zeigte, dass bei einer makroskopisch elastischen Beanspruchung des Duplexgefüges bereits lokal in den Phasen plastische Verformungen auftreten können. Damit verbunden ist ein erhöhtes Risiko für eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung bereits im makroskopisch elastischen Bereich, wenn ausreichend hohe Wasserstoffkonzentrationen im Duplexgefüge vorliegen. Die Ergebnisse der numerischen Simulation entsprechen den experimentellen Beobachtungen zum Wasserstofftransport und den lokalen Beanspruchungen in realen Duplexgefügen. Das Modell erlaubt somit die Identifikation risskritischer Bereiche und kritischer Kombinationen von Wasserstoffkonzentration und lokaler Beanspruchung im Duplexgefüge. Die Ergebnisse der simulierten wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung stimmen mit experimentellen Beobachtungen zugehöriger Bruchtopographien überein.

Insgesamt wird erstmalig eine numerische Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung im Duplexstahl, unter Berücksichtigung der lokalen Beanspruchung und Wasserstoffverteilung in den spezifischen Phasen (Austenit /  $\delta$ -Ferrit), durchgeführt. Die Ergebnisse korrelieren mit experimentellen Beobachtungen und erlauben somit ein besseres Verständnis für die Mechanismen der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen. Die Simulationen unterstützen die Deutung experimenteller Ergebnisse und ermöglichen die Übertragbarkeit auf reale Bauteile.





## Abstract

Duplex stainless steels have been used for a long time in the offshore industry, since they have higher strength than conventional austenitic stainless steels and they exhibit a better ductility as well as an improved corrosion resistance in harsh environments compared to ferritic stainless steels. However, despite these good properties the literature shows some failure cases of duplex stainless steels in which hydrogen plays a crucial role for the cause of the damage.

Numerical simulations can give a significant contribution in clarifying the damage mechanisms. Because they help to interpret experimental results as well as help to transfer results from laboratory tests to component tests and vice versa. So far, most numerical simulations of hydrogen-assisted material damage in duplex stainless steels were performed at the macroscopic scale. However, duplex stainless steels consist of approximately equal portions of austenite and  $\delta$ -ferrite. Both phases have different mechanical properties as well as hydrogen transport properties. Thus, the sensitivity for hydrogen-assisted damage is different in both phases, too. Therefore, the objective of this research was to develop a numerical model of a duplex stainless steel microstructure enabling simulation of hydrogen transport, mechanical stresses and strains as well as crack initiation and propagation in both phases. Additionally, modern x-ray diffraction experiments were used in order to evaluate the influence of hydrogen on the phase specific mechanical properties.

For the numerical simulation of the hydrogen transport it was shown, that hydrogen diffusion strongly depends on the alignment of austenite and  $\delta$ -ferrite in the duplex stainless steel microstructure. Also, it was proven that the hydrogen transport is mainly realized by the ferritic phase and hydrogen is trapped in the austenitic phase. The numerical analysis of phase specific mechanical stresses and strains revealed that if the duplex stainless steel is macroscopically loaded in the elastic range local plastic deformation occurs in both austenite and  $\delta$ -ferrite phase. Thus, there will be an increasing risk for hydrogen-assisted damage already in the macroscopic elastic range, if sufficiently high hydrogen concentrations are present in the microstructure. The results of the numerical simulations correlate well with experimental observations of the hydrogen transport and local stresses and strains in the duplex stainless steel microstructure. Therefore, the model allows identification of crack critical areas as well as crack critical combinations of local hydrogen concentration and local phase specific mechanical load. The results of the numerical fracture analyses agrees well with experimental observations on hydrogen-assisted cracking in duplex stainless steel with corresponding fracture topographies.

Altogether, hydrogen-assisted material damage at the mesoscale level was simulated for the first time taking into account the local stresses and strains as well as the hydrogen distribution in the specific phases (austenite /  $\delta$ -ferrite) of the duplex stainless steels. The results correlate well with experimental observations and thus allow a better insight in the mechanism of hydrogen-assisted material damage. The numerical simulations support the interpretation of experimental results and allow transferring results of laboratory tests to real components.



## Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter in den heutigen Fachbereichen 9.4 „Integrität von Schweißverbindungen“ und 9.3 „Schweißtechnische Fertigungsverfahren“ an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung in Berlin im Rahmen des dortigen Doktorandenprogramms.

Zunächst möchte ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Th. Böllinghaus für die Anregung zu diesem Thema, der fachlichen Betreuung als auch Förderung der Arbeit sowie für die Übernahme des Hauptgutachtens danken. Weiterhin bedanke ich mich bei Herrn Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.-techn. P. Mayr für die Übernahme des Gutachtens sowie bei Herrn Prof. Dr.-Ing. A. Bertram für den Vorsitz der Promotionskommission.

Ein besonderer Dank gilt Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Th. Kannengießer, Herrn Dr.-Ing. A. Pittner und Herrn Univ.-Prof. Dr.-Ing. M. Rethmeier für das Interesse am Fortschritt dieser Arbeit sowie für die Unterstützung und Förderung.

Herrn Dr.-Ing. A. Kromm möchte ich für die Hilfestellung bei der Durchführung und Auswertung der Beugungsexperimente sowie für die auszugsweise Durchsicht der Arbeit danken. Weiterhin bedanke ich mich bei Frau Dr.-Ing. M. Klaus und Herrn Prof. Dr. rer. nat. habil. Ch. Genzel für die Hilfsbereitschaft und Unterstützung während der Durchführung der Beugungsexperimente am Versuchsstand EDDI im HZB Berlin.

Bei den Kollegen Herrn M. Richter, Frau M. Marten und Herrn L. Stempin bedanke ich mich für die Unterstützung bei der Probenvorbereitung und den metallographischen Arbeiten.

Vertretungsweise für alle anderen Kolleginnen und Kollegen möchte ich mich für Ihr Interesse, die große Unterstützung und freundliche Zusammenarbeit vor allem bedanken bei meinen Bürokollegen, den Herren Dipl.-Ing. Th. Lausch, Dr.-Ing. Ch. Heinze, Dipl.-Ing. P. Wyrwich, Dipl.-Wirtsch.-Ing. J. Dixneit, Dipl.-Wirtsch.-Ing. M. Rhode und Dipl.-Ing. Ch. Münster sowie bei Frau S. Ney, Frau J. Seipt, Frau S. Florian, Frau C. Hesse-Andres (M. A.), Herrn Dr.-Ing. M. Bachmann, Herrn Dr.-Ing. P. Schempp, Herrn Dr.-Ing. M. Gebhardt, Herrn Dipl.-Ing. Th. Michael, Herrn K. Scheideck, Herrn Dipl.-Ing. M. Lammers, Herrn Dipl.-Ing. A. Hannemann, Herrn P. Friedersdorf, Herrn M. Gebert und Frau K. Schlechter.

Nicht zuletzt gilt mein Dank meiner Familie die mich immerwährend motiviert und unterstützt hat. Insbesondere danke ich meiner Mutter Elke für die kritische Durchsicht der Arbeit und meiner Lebensgefährtin Isabelle für ihre Unterstützung und Geduld auch in schwierigen Zeiten.

Tobias Mente

Berlin, im März 2015



# Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung .....	vii
Abstract .....	ix
Vorwort .....	xi
Inhaltsverzeichnis .....	xiii
1 Einleitung .....	1
2 Kenntnisstand .....	5
2.1 Austenitisch-ferritische Duplexstähle .....	5
2.1.1 Herstellung und Eigenschaften .....	6
2.1.2 Schäden in Bauteilen, Komponenten und Anlagen aus Duplexstählen .....	12
2.2 Gefüge und Beanspruchung .....	15
2.2.1 Mechanische Eigenschaften und Eigenspannungen der Phasen des Duplexstahls .....	15
2.2.2 Theoretisches Modell und numerische Simulation des mechanischen Verhaltens der Phasen .....	17
2.3 Grundlagen wasserstoffunterstützter Werkstoffschäden .....	23
2.3.1 Wasserstofftransport im festen Metall .....	25
2.3.1.1 Wasserstoffaufnahme und -löslichkeit .....	25
2.3.1.2 Diffusion .....	28
2.3.1.3 Trapping .....	30
2.3.1.4 Enhancing .....	34
2.3.1.5 Effusion .....	39
2.3.2 Mechanismen der Wasserstoffunterstützten Rissbildung .....	40
2.3.3 Ort der Rissentstehung und Risserscheinung .....	43
2.4 Numerische Simulation wasserstoffunterstützter Risse .....	49
2.5 Zusammenfassung und Schlussfolgerung zum Kenntnisstand .....	55
2.6 Aufgabenstellung .....	58
3 Prozeduren zur Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung .....	59
3.1 Werkstoffauswahl und -eigenschaften .....	59
3.2 Numerische Simulation .....	60
3.2.1 Modelle der Realgefüge .....	60
3.2.2 Wasserstofftransport .....	64
3.2.3 Spannungs-Dehnungs-Verteilung .....	67

3.2.4	Werkstoffschädigung .....	73
3.3	Begleitende Experimente .....	78
4	Ergebnisse und Diskussion .....	83
4.1	Wasserstofftransport im Duplexstahl .....	83
4.1.1	Wasserstofftransport im Grundwerkstoff des Duplexstahls .....	84
4.1.1.1	Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Gefügeorientierung.....	84
4.1.1.2	Einfluss von Trapping und Enhancing an der Phasengrenze.....	88
4.1.1.3	Effusion von Wasserstoff.....	91
4.1.2	Wasserstofftransport in Schweißnahtgefügen des Duplexstahls .....	94
4.2	Spannungen und Dehnungen im Duplexstahl.....	99
4.2.1	Vergleich der Randbedingungen und Werkstoffparameter .....	99
4.2.2	Phasenspezifisches mechanisches Verhalten des Duplexstahls.....	104
4.2.2.1	Phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Analyse im einfachen Modell.....	104
4.2.2.2	Phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Analyse im Modell des Realgefüges .....	108
4.2.3	Phasenspannungen und -dehnungen aus makroskopischer Beanspruchung.....	111
4.3	Numerische Simulation der Werkstoffschädigung.....	123
4.3.1	Vorbetrachtungen zur Rissimulation unter Nutzung der Element- Elimination-Technique .....	124
4.3.2	Numerische Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung..	126
4.3.2.1	Werkstofftrennung in einem Risspfad.....	127
4.3.2.2	Werkstofftrennung in mehreren Risspfaden .....	133
4.4	Begleitende Experimente .....	142
4.4.1	Einfluss der Lagerung in Flüssigstickstoff auf die Eigenspannungen .....	142
4.4.2	Ergebnisse der Zugversuche .....	143
4.4.3	Ergebnisse der in-situ Beugungsexperimente im Zugversuch.....	147
4.4.3.1	Vergleich der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven der ex-situ Zugversuche und der in-situ Beugungsexperimente.....	149
4.4.3.2	Phasenspezifische Auswertung der in-situ Beugungsexperimente .....	150
5	Schlussfolgerungen.....	155
6	Ausblick.....	163
	Literaturverzeichnis .....	165

Abbildungsverzeichnis.....	183
Tabellenverzeichnis.....	191
Symbolverzeichnis .....	193
Anhang .....	197





# 1 Einleitung

Die Ansprüche an Stähle gerade im Bereich aggressiver Umgebungsmedien sind in den letzten Jahrzehnten ständig gestiegen. Wirtschaftliche als auch konstruktive Aspekte führen zu immer höheren Anforderungen hinsichtlich der Widerstandsfähigkeit gegenüber korrosiven Medien als auch an die Festigkeit der eingesetzten Werkstoffe. Wo früher korrosionsbeständige austenitische Stähle Einsatz fanden, werden heute vermehrt austenitisch-ferritische Duplexstähle eingesetzt [1–3]. In den 60er und 70er Jahren wurde die Entwicklung der zunächst zufällig entstandenen Duplexstähle durch steigende Preise für Nickel stark vorangetrieben [2]. Die ersten Duplex-Werkstoffe hatten noch kein solch ausgewogenes Verhältnis an austenitischer und ferritischer Phase wie die heutigen Duplexstähle. Dennoch boten sie gegenüber den herkömmlich eingesetzten austenitischen Stählen viele Vorteile. Heutige Duplexstähle besitzen zumeist ein ausgewogenes Verhältnis an Austenit und  $\delta$ -Ferrit von 50:50 [1, 2, 4]. Die Einstellung dieses Phasenverhältnis wird über die Legierungselemente, besonders Stickstoff, und die thermomechanische Herstellung erreicht. Dadurch vereinen die Duplexstähle die sehr gute chemische Beständigkeit, auch gegenüber aggressiven Medien, der austenitischen Chrom-Nickel-Stähle (CrNi-Stähle) mit den höheren Festigkeiten der ferritischen CrNi-Stähle [1–4]. Gleichzeitig bieten sie sehr gute Duktilitätseigenschaften und lassen sich somit auch sehr gut umformen [3].

Duplexstähle werden zum Beispiel im Bereich der chemischen und petrochemischen Industrie, im Schiffs- und Anlagenbau sowie Offshore-Bereich, wo sie für den Transport und die Lagerung von aggressiven Medien verwendet werden, eingesetzt [1, 2, 5]. Aber auch die Bauindustrie verwendet zunehmend Duplexstähle, welche in diesem Bereich zumeist als ästhetische Designelemente gebraucht werden [6]. Durch den Einsatz von Duplexstählen lässt sich im Zuge des Leichtbaus gegenüber austenitischen Stählen auch enorm an Gewicht einsparen [5, 7]. In *Abbildung 1.1* sind typische Beispiele für den Einsatz von Duplexstählen gezeigt.



a) Chemietanker [8]



b) Offshore Plattform [9]

*Abbildung 1.1: Beispiele für den Einsatz von Duplexstählen a) in Tankern für den Transport von chemischen Substanzen und b) auf Offshore-Plattformen für die Ölförderung*

In der Offshore- und Ölindustrie kommen Duplexstähle auch für sicherheitsrelevante Bauteile, wie Ventile und Subsea-Rohrleitungen zum Einsatz [1, 5]. Ein Versagen dieser Komponenten zieht zumeist schwere wirtschaftliche und oft auch katastrophale ökologische Schäden mit sich. Bei der Verwendung von Duplexstählen kam es immer wieder zu Versa-

gensfällen, deren Grund zumeist unbeabsichtigte Einsatzbedingungen waren [5]. So sind zum Beispiel die Aufnahme von Wasserstoff im Gefüge oder eine hohe, aus der Fertigung resultierende lokale Beanspruchung mögliche Ursachen für das Versagen von Bauteilen aus Duplexstahl [5, 10, 11]. Zumal für die Duplexstähle zunächst angenommen wurde, dass eine Werkstoffschädigung in salzhaltigen Medien durch anodische Metallauflösungsprozesse erst bei höheren Temperaturen erfolgt [12]. Jedoch haben Untersuchungen gezeigt, dass mit zunehmend negativen Potentialen (z.B. kathodischer Schutz) die Aufnahme von Wasserstoff im Gefüge eine entscheidende Rolle bei der Werkstoffschädigung hat [12–18].

Die Klärung der Schadensursachen erfolgte zumeist über einfache Labortests und seltener über sogenannte Prüfketten, die von einfachen Labortests bis hin zu „full scale“ Tests am Bauteil reichen. In solchen Prüfketten wird sich zumeist für die Übertragung der Ergebnisse zwischen den einzelnen Prüfverfahren und um einen Einblick in das Materialverhalten bzw. mögliche Mechanismen für ein Versagen zu erhalten, der Finite-Elemente-Methode (FEM) bedient. Auch Taylor et al. [10] nutzen eine solche Prüfkette unterstützt durch numerische Simulationen. Huizinga et al. [11] verwenden in ihren Untersuchungen numerische Methoden zur Ermittlung der lokalen Beanspruchung.

Zur Klärung der Schadensursache und den zugrundeliegenden Mechanismen reicht es im Fall der Duplexstähle jedoch nicht aus, nur das makroskopische Verhalten zu betrachten. Die Duplexstähle haben ein austenitisch-ferritisches Gefüge mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften als auch unterschiedlichem Wasserstofftransportverhalten. Bedingt dadurch ist auch die Empfindlichkeit der Phasen gegenüber einer Degradation ihrer mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff sehr unterschiedlich. Im Vergleich der Phasen ist festzustellen, dass die austenitische Phase als unempfindlicher gegenüber Wasserstoff gilt und die ferritische Phase zumeist eine höhere Empfindlichkeit aufweisen soll [19–21]. Um das Verhalten von Wasserstoff in zweiphasigen Gefügen zu klären, können numerische Simulationen einen entscheidenden Beitrag leisten. Zur Klärung der Ursache einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung ist die Kenntnis über die Verteilung der Wasserstoffkonzentration sowie die lokale Beanspruchung in den Phasen des Duplexstahls von besonders großem Interesse. Dadurch lassen sich kritische Bereiche im Gefüge ermitteln, mögliche Schadensmechanismen klären und das Verständnis für die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung erweitern.

In der Literatur existieren bereits numerische Modelle, mit denen sich erfolgreich eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung auch in Duplexstählen abbilden ließ [22–25]. Jedoch operierten diese Modelle nur auf der makroskopischen Ebene. Auch auf mikroskopischer Ebene bzw. Mesoebene wurden bereits numerische Betrachtungen zur Werkstoffschädigung durchgeführt. Jedoch wurden mit diesen Modellen zumeist nur duktile Werkstofftrennungen dargestellt. Bisher existiert keine numerische Betrachtung der wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung in Duplexstählen, welche die Einflussfaktoren lokale Wasserstoffverteilung und lokale Beanspruchung in den einzelnen Phasen auf der Mesoebene berücksichtigt. Daher war das Ziel dieser Arbeit, ein numerisches Modell zur Abbildung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen auf der Mesoebene bereitzustellen. Die Berücksichtigung aller Einflussfaktoren in einer einfachen und praktischen numerischen Herangehensweise, unter Verwendung eines Modells des Realgefüges stand hierbei im Vordergrund. Ein weiterer Grund war auch, dass bisher ein exis-

tierendes Modell zur Abbildung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung auf homogene Gefüge angewendet wurde. Es kann also dieses Modell genutzt und auf mehrphasige Gefüge erweitert werden.

Zur Durchführung dieser Arbeit erfolgte zunächst eine Literaturstudie zur wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in austenitisch-ferritischen Duplexstählen mit Hinblick auf die numerische Umsetzung und experimentelle Ermittlung des Werkstoffverhaltens. Dabei wird auf das Transportverhalten von Wasserstoff, das mechanische Verhalten und die Rissbildung unter Einfluss von Wasserstoff im Duplexstahl eingegangen. Anschließend wird die Vorgehensweise bei der numerischen Simulation der Werkstoffschädigung erläutert und die verwendeten numerischen Modelle beschrieben. Abschließend werden die numerisch ermittelten Ergebnisse des Wasserstofftransports, der Spannungs-Dehnungs-Verteilung sowie Rissinitiation und Rissfortschritt in den Phasen des Duplexstahls dargestellt und diskutiert.



## 2 Kenntnisstand

In diesem Kapitel wird zunächst kurz auf die Entwicklung der austenitisch-ferritischen Duplexstähle eingegangen und deren Herstellung, Eigenschaften sowie Schadensfälle, verursacht durch Wasserstoff, erläutert. Im Anschluss daran wird auf die Grundlagen der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Bezug auf die austenitisch-ferritischen Duplexstähle näher eingegangen und Möglichkeiten zur numerischen Umsetzung erläutert.

### 2.1 Austenitisch-ferritische Duplexstähle

Die ersten Duplexstähle mit austenitisch-ferritischer Gefügestruktur wurden Anfang der 30er Jahre entwickelt als festgestellt worden ist, dass sich die Gießbarkeit sowie die Streckgrenze austenitischer korrosionsbeständiger Stähle durch ferritische Gefügeanteile deutlich verbessern lässt [1]. Daraufhin wurde 1930 die erste Generation der Duplexstähle in Schweden kommerziell hergestellt, da in der Zellstoffindustrie ein gegen interkristalline Korrosion beständiger Stahl benötigt wurde, der die bis dahin noch hoch kohlenstoffhaltigen austenitischen Stähle ersetzen sollte [2]. In Frankreich wurde 1936 Patent auf den Duplexstahl URANUS50 zugelassen. Dieser Duplexstahl hatte einen ferritischen Volumenanteil von 20 % bis 35 % und kam aufgrund der guten Korrosionseigenschaften in der Öl-, Papier-, Lebensmittel- und pharmazeutischen Industrie zum Einsatz. Dieser Duplexstahl hatte eine verbesserte Beständigkeit gegenüber chloridinduzierter Spannungsrisskorrosion als herkömmliche austenitische Stähle, bedingt durch das zweiphasige Gefüge und abgesenkte Kohlenstoffgehalte [2]. Jedoch waren die Phasenverhältnisse in den Duplexstählen der ersten Generation noch nicht ausgewogen. Gleichzeitig wurde in Finnland die Entwicklung von Duplexstählen mit ca. 25 % Chrom vorangetrieben. Durch Zugabe von Stickstoff ließen sich die Gieß- und Schweißseigenschaften der Duplexstähle noch weiter ausbauen und sogar eine verbesserte Beständigkeit gegen interkristalline Korrosion erreichen [1]. In den 60er und 70er Jahren wurde die Entwicklung der Duplexstähle durch steigende Preise für Nickel und die hohe Nachfrage an korrosionsbeständigen Stählen in der Offshore-Industrie stark vorangetrieben [2]. Mit der Entwicklung von Prozessen zur Entkohlung der Schmelzen in der Stahlindustrie waren die Duplexstähle der zweiten Generation geboren. Durch die geringen Gehalte an Kohlenstoff ließ sich die schweißtechnische Verarbeitung sowie die Korrosionsbeständigkeit nochmals verbessern. Neben den herausragenden Korrosionseigenschaften besaßen diese Stähle ein ausgewogeneres Volumenverhältnis von austenitischer und ferritischer Gefügephase, wodurch sich auch höhere Festigkeiten als mit herkömmlichen austenitischen korrosionsbeständigen Stählen erreichen ließen [1, 2]. Zur weiteren Erhöhung der Korrosionsbeständigkeit wurden diesen Stählen noch Legierungselemente wie Molybdän, Wolfram oder Kupfer zulegiert. Die zweite Generation der Duplexstähle entspricht dem heutigen Duplexstahl X2CrNiMo 22-5-3 (Wst.-Nummer 1.4462) [1, 2]. Ende der 80er Jahre wurden aus dieser Legierungsreihe heraus höher und niedriger legierte Duplexstähle entwickelt, die heute als Super- bzw. Leanduplexstähle bekannt sind. Die Weiterentwicklung der Herstellungsverfahren und Legierungskonzepte ermöglicht heute die Herstellung von Hyperduplexstählen, die sich ohne Ausscheidung intermetallischer Phasen schweißtechnisch verarbeiten lassen [1]. Die Herstellung und Eigenschaften von modernen austenitisch-ferritischen Duplexstählen sind im Folgenden näher erläutert.

### 2.1.1 Herstellung und Eigenschaften

Moderne Duplexstähle zeichnen sich durch ein ausgewogenes Verhältnis an austenitischer und ferritischer Gefügephase aus. Die primäre Erstarrung des Duplexgefüges wird über die chemische Zusammensetzung bestimmt und lässt sich mit Hilfe eines thermodynamisch basierten mathematischen Modells [26] unter Nutzung des Chrom- und Nickeläquivalentes wie folgt bestimmen, *Gleichung (2.1)* bis *Gleichung (2.3)*.

$$\Phi = Ni_{eq} - 0,75Cr_{eq} + 0,257, \text{ mit} \quad (2.1)$$

$$Ni_{eq} = Ni + 0,31Mn + 22C + 14,2N + Cu, \quad (2.2)$$

$$Cr_{eq} = Cr + 1,37Mo + 1,5Si + 2Nb + 3Ti, \text{ und} \quad (2.3)$$

$\Phi \ll 0$ : primär ferritische Erstarrung,

$\Phi \gg 0$ : primär austenitische Erstarrung,

$\Phi \sim 0$ : ferritisch-austenitische Erstarrung.

Ist der prozentuale Gehalt an ferritstabilisierenden Elementen hoch, so erstarrt das Material auf der chromreichen Seite des eutektischen Feldes [4], Abbildung 2.1. Dabei werden zunächst Ferritkristalle ( $\delta$ -Eisen) in der Schmelze gebildet und mit zunehmender Abkühlung liegt ein vollständig  $\delta$ -ferritisches Gefüge vor. Mit zunehmender Abkühlung scheidet sich diffusionskontrolliert in der festen Phase inter- und intragranular Austenit ( $\gamma$ -Eisen) aus [4]. Mit zunehmend langsamer Abkühlung und größeren Anteilen an austenitstabilisierenden Elementen verschiebt sich die Erstarrung der Duplexwerkstoffe mehr in Richtung der eutektischen Rinne. Dennoch beginnt die Erstarrung primär ferritisch. Die ferritstabilisierenden Elemente in der Schmelze werden dadurch reduziert und die Konzentration an austenitstabilisierenden Elementen steigt leicht an. Das Gleichgewicht verschiebt sich in Richtung des drei Phasen Bereichs Schmelze + Alpha + Gamma ( $S+\alpha+\gamma$ ), was die Bildung von Austenitkristallen begünstigt, Abbildung 2.1. Die Bildung von Austenit führt wiederum zum Anstieg der Konzentration der ferritstabilisierenden Elemente. Diese wechselseitige Kristallisation, auch flip-flop Erstarrung genannt [4], führt zur gleichzeitigen Erstarrung von  $\alpha$ -Dendriten sowie interdendritischen  $\gamma$ -Kristallen und wiederholt sich bis zur kompletten Erstarrung der Schmelze. Mit zunehmender Abkühlung erhöht sich die Volumenkonzentration an Austenit durch das Wachsen der Austenitkristalle oder auch nahezu diffusionslose Festphasenumwandlung des Ferrits in Austenit [4].

Bedingt durch diesen Erstarrungsvorgang entsteht ein austenitisch-ferritisches Gefüge in einem Verhältnis von 40:60 bis 60:40. Idealerweise ist ein Verhältnis von 50 % Austenit zu 50 %  $\delta$ -Ferrit optimal für die mechanischen und Korrosionseigenschaften des Duplexstahls [4]. Dieses Verhältnis lässt sich durch eine entsprechende Wärmebehandlung im Anschluss an das Warm- oder Kaltwalzen erreichen. Zudem wird über die Wärmebehandlung die Kaltverfestigung sowie die Ausscheidung intermetallischer Phasen während der Abkühlung reduziert [3]. Auch das Verhältnis der Legierungselemente in den Phasen des Duplexstahls lässt sich so wieder annähern. Das Lösungsglühen wird bei Temperaturen zwischen 1040 °C und 1100 °C für mehrere Stunden durchgeführt [27]. Im Anschluss werden die Stähle auf Raumtemperatur abgeschreckt, um die erneute Ausscheidung intermetallischer

Phasen, wie in Abbildung 2.1 dargestellt, zu vermeiden. Die Zugabe von Stickstoff verbessert die Anlassbehandlung und ermöglicht eine leichtere Einstellung des Phasengleichgewichtes zwischen  $\delta$ -Ferrit und Austenit. Stickstoff und Kohlenstoff erweitern als austenitstabilisierende Elemente das Austenitgebiet zu höheren Chromgehalten und verschieben die Ferritbildung zu höheren Temperaturen [2, 28]. Eine Übersicht zu möglichen Ausscheidungen intermetallischer Phasen ist in der Literatur von Nilsson [27] und Lo et al. [21] gegeben.

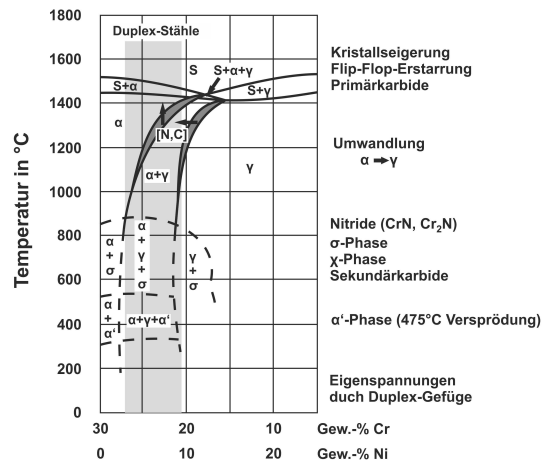


Abbildung 2.1: Quasi-Binärer Schnitt des Eisen-Chrom-Nickel-Phasendiagramms bei 70 % Eisen, Bereich der Duplexstähle (grau) und Überblick über mögliche Phasenausscheidungen, nach [2, 4, 28]

Sind intermetallische Phasen in einem Duplexgefüge vorhanden, so werden zumeist eine Erhöhung der Festigkeit sowie eine Absenkung der Duktilität und Korrosionsbeständigkeit festgestellt [21, 27, 29–34]. Der Duktilitätsverlust als auch die verschlechterte Korrosionsbeständigkeit wirkt sich hinsichtlich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung negativ aus. Zumal die Ausscheidung der spröden Phasen häufig in der ferritischen Phase bzw. an der Phasengrenze zwischen Austenit und  $\delta$ -Ferrit erfolgt. Saithala et al. [34] stellen in Slow Strain Rate Test (SSRT) Versuchen am Duplexstahl fest, dass das Vorhandensein von größeren Anteilen an spröden intermetallischen Ausscheidungen zur merklichen Reduktion der Zeit bis zum Versagen (TTF – Time To Failure) führt. Die stärkere Degradation der mechanischen Eigenschaften der Duplexstähle bei Existenz von spröden intermetallischen Ausscheidungen und Wasserstoff im Gefüge wird auch von anderen Autoren bestätigt [29, 32, 33]. Dabei genügen hier bereits geringere Wasserstoffkonzentrationen für eine Rissbildung als in nahezu ausscheidungsreichen Duplexstählen.

In Abbildung 2.2 ist die typische Mikrostruktur eines gewalzten Duplexstahl dargestellt. Deutlich zu erkennen ist die Anisotropie des Gefüges mit der länglichen Anordnung austenitischer und ferritischer Gefügephase in Walzrichtung. Bedingt durch diese längliche Gefügeanordnung ergeben sich auch unterschiedliche mechanische Eigenschaften in verschiedenen Belastungsrichtungen [35–41]. Zumeist kann ein leichter Anstieg der 0,2 % Dehngrenze und der Zugfestigkeit, verbunden mit einem leichten Abfall der Verformbarkeit, bei Belastung quer zur Walzrichtung festgestellt werden. Diese makroskopisch anisotropen Werkstoffeigenschaften resultieren neben der länglichen Gefügeorientierung auch aus der

Kristallorientierung (Textur) der einzelnen Phasen selbst [35–41]. Hutchinson et al. [35] stellen z.B. heraus, dass in beiden Phasen scharfe bevorzugte Kristallorientierungen vorliegen. Diese führen im Zusammenspiel beider Phasen zu einer texturrellen Verfestigung, welche in einer einzelnen Phase allein eher nicht so stark ausgeprägt auftreten würde. Auch andere Autoren [37, 38, 41] bestätigen die texturrelle Verfestigung aufgrund der kristallographischen Orientierung.

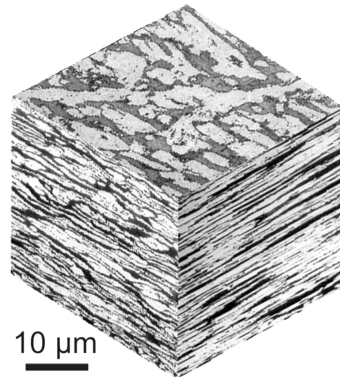


Abbildung 2.2: Gefügestruktur eines gewalzten Duplexstahls [4]

In *Tabelle 2.1* sind typische Vertreter der Duplexstähle unterschiedlicher Arten aufgelistet. Die Einteilung der Duplexstähle in vier Arten wird dabei häufig über die Wirksumme der Elemente Chrom, Molybdän und Stickstoff (engl.: pitting resistance equivalent PRE) zur Abschätzung der Korrosionsbeständigkeit gegenüber Loch- oder Spaltkorrosion vorgenommen [4, 27, 42], *Gleichung (2.4)*. Je nach berechnetem PRE lassen sich die Duplexstähle den vier Duplextypen zuordnen: Leanduplex  $\leq 35 <$  Duplex  $< 40 \leq$  Superduplex  $< 45 \leq$  Hyperduplex.

$$PRE = Cr + 3,3Mo + 16N \quad (2.4)$$

*Tabelle 2.1: Typische chem. Zusammensetzungen (in Gew.-%) der vier Arten von Duplexstählen [43]*

	Leanduplex	Duplex	Superduplex	Hyperduplex
<b>Wst.-Nummer</b>	1.4162	1.4462	1.4410	-
<b>UNS-Nummer</b>	S32101	S32205	S32750	S32707
<b>C</b>	$\leq 0,4$	$\leq 0,03$	$\leq 0,03$	$\leq 0,03$
<b>Cr</b>	21-22	22-23	24-26	26-29
<b>Ni</b>	1,35-1,70	4,5-6,5	6-8	5,5-9,5
<b>Mo</b>	0,1-0,8	3,0-3,5	3-5	4-5
<b>N</b>	0,20-0,25	0,14-0,20	0,24-0,32	0,3-0,5
<b>Mn</b>	4-6	$\leq 2,0$	$\leq 1,2$	$\leq 1,5$
<b>Cu</b>	0,1-0,8	-	$\leq 0,5$	$\leq 1,0$
<b>PRE</b>	25	35	43	49



Zu sehen ist, dass mit zunehmenden Masseanteilen an Chrom, Molybdän, Stickstoff aber auch Nickel das PRE steigt. Der Kohlenstoffgehalt ist in allen Arten sehr niedrig, was zu einer guten Schweißbarkeit sowie Beständigkeit gegen interkristalline Korrosion beiträgt. Die Hauptlegierungselemente der Duplexstähle sind Chrom, Nickel, Molybdän und Stickstoff, wobei für die Leanduplexstähle der Nickelanteil durch Mangan substituiert wird. Die Substitution von Nickel durch Mangan hat auch einen wirtschaftlichen Vorteil [2, 44]. Die herausragenden mechanischen und Korrosionseigenschaften werden durch ein ausbalanciertes Verhältnis entsprechender Legierungselemente und einem ausgewogenen Phasenverhältnis erreicht. Im Folgenden soll kurz auf einige Legierungselemente und deren Wirkung auf die Eigenschaften der Duplexstähle eingegangen werden.

### Chrom

Chrom als Ferritbildner ist eines der Hauptlegierungselemente der Duplexstähle. Ein Chromgehalt von mindestens 12 % ist notwendig, um eine stabile Chromoxidschicht auf der Metalloberfläche zum Schutz vor korrosiven Angriffen auszubilden [42, 44]. Die typischen Chromgehalte liegen bei den Duplexstählen zwischen 20-29 % und verleihen ihnen eine erhöhte Beständigkeit gegen allgemeine Korrosion aber auch Lochkorrosion in sauren Medien. Mit höheren Chromgehalten besteht aber zunehmend die Gefahr der Ausscheidung spröder intermetallischer Phasen [21, 27] wie in Abbildung 2.1 gezeigt ist, was sich wiederum negativ auf die mechanischen Eigenschaften auswirkt.

### Nickel

Nickel ist ein stark austenitstabilisierendes Element und trägt in den Duplexstählen zur Einstellung eines ausgewogenen Phasenverhältnisses und somit zur Duktilität bei. Nickel erhöht die Spaltkorrosionsbeständigkeit und unterstützt die Ausbildung der Passivschicht [42, 44]. Jedoch kann die Zugabe von Nickel in Duplexstählen auch die Ausscheidung intermetallischer Phasen fördern, da Nickel die Anreicherung des  $\delta$ -Ferrits mit den Elementen Chrom und Molybdän begünstigt [44].

### Molybdän

Molybdän gehört wie Chrom zu den Elementen, die den ferritischen Bereich stabilisieren. Durch Molybdängehalte von mindestens 3 %, aber höchstens 4 %, wird die Korrosionsbeständigkeit in saurer Umgebung (allgemeine, lokale, Spalt- und Spannungsrisskorrosion) verbessert [42, 44]. Der Molybdängehalt sollte jedoch 4 % nicht überschreiten, da Molybdän die Bildung der spröden Sigma-Phase sowie die 475 °C Versprödung z.B. in ferritischen CrNi-Stählen begünstigt [21, 27, 42].

### Stickstoff

Stickstoff ist das Legierungselement mit dem meisten Einfluss auf die Gefügeausbildung, da es die austenitische Phase auch schon bei hohen Temperaturen stabilisiert [45] und so für ein besseres Verhältnis von Austenit und  $\delta$ -Ferrit beiträgt. Auch lässt sich durch Stickstoff die Festigkeit und Duktilität der Legierungen [46], sowie die Korrosionsbeständigkeit und Schweißbarkeit verbessern [42, 44]. Zudem reduziert Stickstoff die Entmischung von Chrom und Molybdän in beiden Phasen des Duplexstahls und verringert somit das Risiko für die Ausscheidung intermetallischer Phasen.

### Mangan

Mangan ist ein austenitstabilisierendes Element und wird verstärkt in den Leanduplex Varianten eingesetzt, um Nickel zu substituieren. Neben dem wirtschaftlichen Vorteil von Mangan gegenüber Nickel, erhöht Mangan die Stickstofflöslichkeit [44]. In Kombination mit Stickstoff wird die Lochkorrosionsbeständigkeit erhöht [42, 44].

### Weitere Legierungselemente

Zur Verbesserung der Korrosionseigenschaften werden den Duplexstählen teilweise zusätzlich noch Legierungselemente wie Kupfer [47], Wolfram und Silizium zugegeben [42, 44]. Jedoch werden von diesen Elementen nur sehr geringe Mengen zulegiert, da diese Elemente intermetallische Ausscheidungen begünstigen können. Silizium fördert zum Beispiel die Ausbildung der Chromoxidschicht aber auch die Ausbildung der spröden Sigma-Phase [42].

Der Kohlenstoffgehalt ist in den Duplexstählen generell sehr niedrig gehalten, um die Ausscheidung von Chromkarbiden zu vermeiden und so die Resistenz gegenüber interkristalliner Korrosion zu verbessern. Zudem wird die Schweißbarkeit durch niedrige Gehalte an Kohlenstoff gefördert.

Über diese Legierungskonzepte erreichen die Duplexstähle sehr gute Korrosionseigenschaften in einer Vielzahl unterschiedlich aggressiver Medien. Zudem werden gleichzeitig höhere Festigkeiten erreicht, als bei den rein austenitischen oder ferritischen CrNi-Stählen [1, 2]. Sie kombinieren die Festigkeitseigenschaften der ferritischen korrosionsbeständigen Stähle mit den Duktilitätseigenschaften der austenitischen korrosionsbeständigen Stähle. Bedingt durch das Kaltwalzen mit anschließendem Lösungsglühen können in den Duplexstählen sehr kleine Korngrößen eingestellt werden [48], wodurch die Duplexstähle höhere Festigkeiten als rein austenitische oder rein ferritische CrNi-Stähle erreichen, *Tabelle 2.2*.

*Tabelle 2.2: Chemische Zusammensetzung in Gew.-% und mech. Eigenschaften korrosionsbeständiger Stähle, nach [4]*

Gefüge	C	Cr	Ni	DIN	R <sub>p0,2</sub> in MPa	R <sub>m</sub> in MPa	A <sub>5</sub> in %
Ferrit	< 0,1	13-30	< 1	1.4015	345	540	20
Austenit	< 0,1	17-26	7-26	1.4301	190	450	45
Duplex	< 0,1	24-28	4-7	1.4462	450	700	25

Das Verhältnis der Phasenanteile sowie deren Beschaffenheit haben einen maßgeblichen Einfluss auf die mechanischen Eigenschaften der Duplexstähle. Hierzu wurden von einigen Autoren Untersuchungen angestrengt, um den Einfluss des Phasenverhältnisses [49, 50], der Korngröße [48], der Anisotropie des Gefüges [35] sowie von Stickstoff [51, 52] auf die makroskopischen mechanischen Eigenschaften zu prüfen.

Floreen und Hayden [49] haben in ihrer Arbeit sogenannte „tie-line“ Legierungen mit unterschiedlichen Phasenverhältnissen von voll ferritisch bis voll austenitisch untersucht. Dabei wurde die chemische Zusammensetzung der einzelnen Phasen jeweils konstant gehalten. Es stellte sich heraus, dass mit zunehmendem  $\delta$ -Ferritgehalt auch die 0,2 % Dehngrenze

ansteigt. Das Verhältnis des Festigkeitsanstieges zum ferritischen Volumenanteil war bis 60 %  $\delta$ -Ferrit nahezu linear. Für höhere  $\delta$ -Ferritgehalte verschwand die Linearität zunehmend. Die Autoren führen dies auf die Zunahme der Korngröße im  $\delta$ -Ferrit zurück.

Auch Tamura et al. [50] haben den Einfluss des  $\delta$ -Ferritgehalts auf die Festigkeitseigenschaften untersucht. Dabei wurde über eine Wärmebehandlung versucht, die Korngröße konstant zu halten. Auch hier ließ sich ein konstanter Anstieg der Festigkeit mit zunehmenden Anteilen an  $\delta$ -Ferrit bis ca. 70 % feststellen. Auch sie konnten eine Abnahme der Festigkeitskennwerte mit zunehmender Korngröße bestätigen.

Dollar und Gorczyca [48] haben den Einfluss der Korngröße auf die Fließeigenschaften der Duplexstähle untersucht und gezeigt, dass sich die Festigkeit in Abhängigkeit der Korngröße über die bekannte Hall-Petch [53] Beziehung beschreiben lässt. Bekannt ist auch, dass ein feinkörniges Gefüge verbesserte Duktilitätseigenschaften aufweist und somit positiv einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung entgegenwirken kann. Jedoch hat die Korngröße auch einen Einfluss auf das Wasserstofftransportverhalten, wie im *Kapitel 2.3.1* noch erläutert wird.

Neben der Korngröße und dem Phasenanteil spielt die Anordnung der Phasen im Gefüge, deren mechanisches Verhalten und die Kristalltextur auch eine wesentliche Rolle für die Festigkeitseigenschaften der Duplexstähle [35–41].

Duplexstähle werden heute in vielen Bereichen der Industrie eingesetzt. Wegen ihrer sehr guten Korrosionsbeständigkeit auch in aggressiven Medien und den hohen Festigkeiten finden Duplexstähle vermehrt Einsatz im Offshore-Bereich, für den Transport von Gas und Öl in der chemischen und petrochemischen Industrie sowie im Schiff- und Automobilbau [1, 2]. Sie ersetzen heute erfolgreich in vielen Bereichen austenitische CrNi-Stähle, wie den Werkstoff 1.4404 (AISI 316L), und es werden vermehrt auch Leanduplex-Stähle verwendet [1, 2, 44]. Aber auch die Lebensmittel-, Papier- und Pharmaindustrie sowie der Kraftwerksbau profitieren von den Eigenschaften der Duplexstähle.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Duplexstähle in ihrer Vielfalt ein sehr hohes Potential gegenüber handelsüblichen ferritischen und austenitischen CrNi-Stählen bieten. Sie haben zumeist weitaus bessere Festigkeitseigenschaften kombiniert mit einem hohen Verformungsvermögen. In vielen Bereichen bieten Duplexstähle einen besseren Widerstand gegen korrosive Angriffe in einer Vielzahl aggressiver Medien als die austenitischen Stähle. Da die Anforderungen an Werkstoffe bezüglich ihrer Festigkeit und Korrosionseigenschaften in den letzten Jahren immer weiter gestiegen sind, bieten die Duplexstähle somit eine günstige Alternative zu den herkömmlich eingesetzten Stählen. Zudem haben die Duplexstähle, bedingt durch den niedrigen Kohlenstoffgehalt und niedrigen Gehalten an Phosphor und Schwefel, eine gute Schweißbarkeit sowie Umformbarkeit.

### 2.1.2 Schäden in Bauteilen, Komponenten und Anlagen aus Duplexstählen

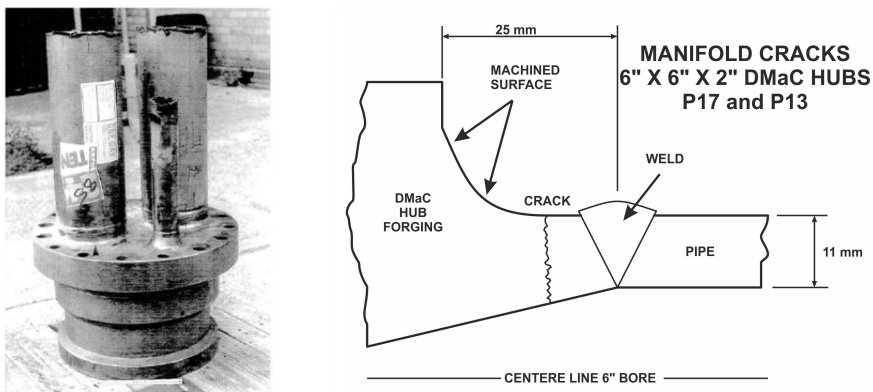
Trotz der herausragenden mechanischen und Korrosionseigenschaften (auch in chloridhaltigen Medien) kam es in der Vergangenheit bei der Verwendung von Duplexstählen mehrfach zu Schadensfällen. Häufig waren unsachgemäße Verwendung oder unberücksichtigte Einflüsse Ursache des Schadens. Im folgenden Abschnitt wird deshalb beispielhaft auf zwei Schadensfälle und deren Ursache sowie Vermeidung eingegangen.

In vielen industriellen Bereichen treten Schadensfälle auf, die mit der schädlichen Wirkung von Wasserstoff in Verbindung gebracht werden. Die durch Wasserstoff hervorgerufenen Schäden sind meist mit sehr hohen Kosten und nicht selten auch mit der Gefährdung von Menschenleben verbunden. Häufig treten die wasserstoffunterstützten Schäden sehr unerwartet auf, da bei Einsatz der Duplexstähle verschiedene Randbedingungen oder mehrere gekoppelte Einflüsse keine Berücksichtigung fanden. Für die Duplexstähle wurde früher davon ausgegangen, dass eine Werkstoffschädigung durch Spannungsrisskorrosion in chloridhaltigen Medien bevorzugt bei höheren Temperaturen sowie höheren Gehalten an Schwefelwasserstoff ( $H_2S$ ) und Chloridionen durch anodische Metallauflösung, verbunden mit Gleitprozessen, erfolgt [12]. Jüngere Literatur [12–17, 54] zeigt jedoch, dass auch bei geringeren Temperaturen und höheren pH-Werten Wasserstoff in den Duplexstahl aufgenommen werden kann. So können Liu et al. [13], El-Yazgi und Hardi [14], Chou und Tsai [15], Zucchi et al. [16], Roychowdhury und Kain [17] sowie Woollin und Gregori [18] in ihren Untersuchungen zum Verhalten von Duplexstählen in künstlichem Meerwasser mit zunehmend negativen Potentialen eine starke Degradation der mechanischen Eigenschaften in Form von einer Abnahme der Duktilität feststellen. Die Autoren führen den starken Duktilitätsabfall auf die Aufnahme von Wasserstoff im Gefüge zurück, wobei dieser Effekt durch hohe Schwefelwasserstoffkonzentrationen verstärkt wird [12–17, 54]. Auch geringe pH-Werte und hohe Chloridionenkonzentrationen unterstützen die schädigende Wirkung des Wasserstoffs. Daher ist eine Beteiligung von Wasserstoff und somit eine Werkstoffschädigung durch wasserstoffunterstützte Spannungsrisskorrosion (engl.: Hydrogen-Assisted Stress Corrosion Cracking - HASCC) nicht auszuschließen [12].

So zum Beispiel auch bei Schadensfällen im Offshore-Bereich. Hier werden sehr oft Schutzmaßnahmen getroffen, um weniger korrosionsbeständige Stähle (niedriglegierte Stähle) vor korrosiven oder elektrochemischen Angriffen zu schützen. Wobei die zu schützenden Stähle auch mit höherlegierten korrosionsbeständigen Werkstoffen wie die Duplexstähle elektrochemisch gekoppelt sein können. Für einen kathodischen Schutz werden Opferanoden elektrochemisch mit den zu schützenden Komponenten, z.B. eine Subsea-Rohrleitung umgeben von Meerwasser, verbunden. Bei größeren zu schützenden Komponenten wird zusätzlich ein negatives Potential angelegt. Jedoch kann ein solcher kathodischer Schutz der Komponenten, in Abhängigkeit vom Potential und dem vorliegenden Medium, zur Aufnahme nicht geringfügiger Mengen an Wasserstoff (z.B. auf der Rohroberfläche) über einen längeren Zeitraum hinweg führen [12–17, 54]. Aber auch Bakterien, welche das im Umgebungsmedium enthaltene Sulfat reduzieren, können zu einer Aufnahme von Wasserstoff beitragen [55]. Die so aufgenommenen hohen Mengen an Wasserstoff beeinflussen die mechanischen Eigenschaften der betroffenen Stähle und können zu einer oft über längere Zeit unentdeckten Schädigung des Werkstoffes führen. Die Schädigung des Werkstoffes entsteht dabei zumeist durch Zusammenwirken von hohen Wasserstoffkonzentrationen mit weiteren Faktoren, wie Spannungen und Dehnungen sowie kritische

Gefüge oder Gefügeunregelmäßigkeiten. Nachfolgend werden zwei Schadensfälle vorgestellt, bei denen eine Wasserstoffaufnahme unter kathodischem Schutz zum Bauteilversagen beigetragen hat.

Taylor et al. [10] berichten von einem Schadensfall aus geschmiedetem Duplexstahl (Wst.-Nr.: 1.4501, X2CrNiMoCuWN 25-7-4) im BP Amoco Foinaven Feld 190 km westlich der Shetland Inseln. Während einer routinemäßigen Druckprüfung sechs Monate nach der Installation traten in dem Verbindungsstück zwischen der Ventilinsel (Manifold) und der Produktionspipeline Leckagen auf. Nach Bergung der Verbindung zeigten sich Risse auf dem gesamten Umfang der angeschweißten Rohre in einiger Entfernung zur Schweißnaht und Wärmeinflusszone, *Abbildung 2.3*. Bis zu dem Zeitpunkt der Druckprüfung wurden schon weitere Rohrverteilungen aus dem gleichen Material im Feld installiert. Nach Begutachtung der bereits installierten Verteilungen konnten jedoch keine weiteren Risse lokalisiert werden. Zur Feststellung der Schadensursache wurde ein Expertenteam zusammengestellt, das sich mit dem Schadensfall in einer Reihe von Basisuntersuchungen bis hin zu Full-Scale Tests, begleitet von numerischen Simulationen befasste [10]. Als Ursache wurde ein Zusammenspiel mehrerer Faktoren ausgemacht [10]. Die Rohrleitung war ungeschützt dem Meerwasser ausgesetzt, was in erster Linie kein Risiko für eine Korrosion darstellt, da der Werkstoff für den Einsatz in Meerwasser geeignet ist. Jedoch wurde das gesamte System über eine Aluminiumanode kathodisch geschützt, was zu einer Wasserstoffaufnahme führte. Des Weiteren ergab die Untersuchung des Gefüges eine grobe Gefügestruktur mit paralleler Anordnung der austenitischen und ferritischen Gefügeanteile in Dickenrichtung des Rohres [10].



*Abbildung 2.3: Verbindungsstück aus geschmiedetem Duplexstahl und Ort der wasserstoffunterstützten Rissbildung [10]*

Mit Hilfe von numerischen Analysen im Abgleich mit Full-Scale Tests konnte festgestellt werden, dass es am Übergang des Flansches während der Druckprüfung sehr lokal zu einer plastischen Verformung kommen kann. Diese kann dazu führen, dass lokal eine Verfestigung mit Erhöhung der Dehngrenze erfolgt. Dadurch bleiben die später im Betrieb vorherrschenden lokalen Dehnungen in diesem Bereich unterhalb der neuen Dehngrenze und ein kaltes Kriechen wird verhindert [10]. Im Fall der versagten 6" Rohrleitung sind jedoch die Orte der maximalen Beanspruchung während des Drucktests und im späteren Betrieb, bedingt durch die Rohrgeometrie, unterschiedlich. Deshalb kann sich der positive

Effekt der lokalen Plastifizierung nicht einstellen, sodass im späteren Betrieb die lokale plastische Verformung unter Einfluss von Wasserstoff möglicherweise zu einer Rissinitiierung führt. Die numerische und experimentelle Prüfung des Materials ergab, dass durch die Fertigung und schweißtechnische Verarbeitung Dehnungen in Höhe von 0,25 % im Material vorlagen [10]. Für die Einleitung einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung wurde für die vorliegenden Bedingungen über Basisprüfungen bis hin zum Full-Scale Test sowie mit Hilfe numerischer Simulationen eine Gesamtdehnung von 0,5 % als kritischer Wert bestimmt [10]. Der bei diesen Bedingungen initiierte Riss benötigt nur acht bis zehn Tage für den Rissfortschritt im gesamten Werkstoff bis zum vollständigen Versagen. Nach Abschluss der Untersuchungen wurde ein Langzeitdrucktest der bereits verbauten Rohrinstallationen durchgeführt, um auszuschließen, dass keine weiteren Risse in den verbliebenen Rohrinstallationen vorhanden sind. Mit diesem Prüfverfahren konnte nachgewiesen werden, dass in den bereits installierten Rohren keine Schädigung vorliegt. Zudem wurden die entsprechenden Anschlüsse mit einer Polyuretaneinhausung vom kathodischen Schutz entkoppelt. Dadurch konnten die Rohrverbindungen im Feld verbleiben und größere ökologische und wirtschaftliche Schäden vermieden werden [10].

Ein weiterer Schadensfall im gleichen Werkstoff wird in der Arbeit von Huizinga et al. [11] kommuniziert. Hier versagte nach der Inbetriebnahme und einem geplanten Shutdown ein Rohranschluss nahe der Schweißnaht, *Abbildung 2.4*. Durch kathodischen Schutz wurde Wasserstoff in den Werkstoff aufgenommen und der Riss entwickelte sich nahe einer Querschnittsänderung [11]. Messungen der Wasserstoffkonzentration ergaben für den unverarbeiteten Werkstoff eine Wasserstoffkonzentration von zwei bis zehn wt.-ppm, in Abhängigkeit vom Ort der Messung. Durch den kathodischen Schutz wurde im geschädigten Bauteil nahe der Oberfläche eine Wasserstoffkonzentration von 300 wt.-ppm festgestellt. Zudem gehen die Autoren davon aus, dass plastische Verformungen und hohe Spannungen im Bereich der Querschnittsänderung eine erleichterte Wasserstoffaufnahme ermöglichen [11]. Die Autoren bemerken, dass der Rissfortschritt überwiegend in der ferritischen Phase stattgefunden hat. Zur Vermeidung solcher Schäden geben die Autoren an, dass die Gesamtbeanspruchung des Bauteils (Eigen- und Lastspannungen, Spannungskonzentration bedingt durch die Geometrie) unterhalb von 90 % der Streckgrenze (<0,4 % Dehnung) gehalten werden müssen [11]. Zudem sollte das Potential des kathodischen Schutzes reduziert oder der betroffene Duplexwerkstoff vom kathodischen Schutzsystem entkoppelt werden.

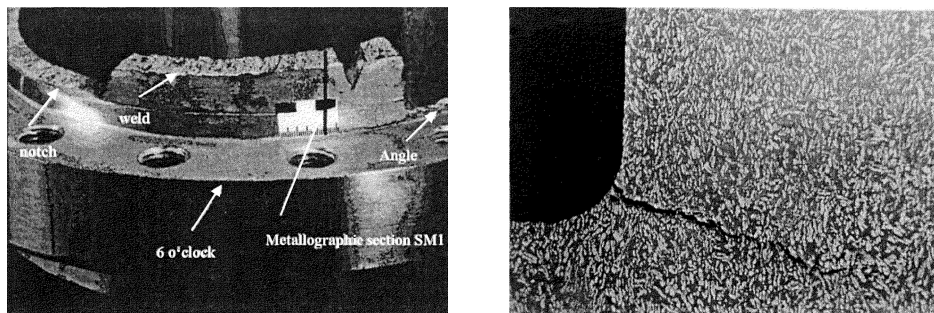


Abbildung 2.4: Rissfortschritt entlang der Querschnittsänderung in der Nähe der Schweißnaht und Querschliff mit Riss vorwiegend im  $\delta$ -Ferrit (dunkel) [11]

Diese Schadensfälle zeigen, wie wichtig die Kenntnis der Wirkung von Wasserstoff im Zusammenspiel mit Spannungen und Dehnungen in einem für Wasserstoff sensiblem Gefüge ist, damit Schadensmechanismen aufgeklärt und Schadensfälle sicher vermieden werden können.

## 2.2 Gefüge und Beanspruchung

Durch den zweiphasigen Gefügeaufbau, der Gefügeorientierung resultierend aus der Herstellung und der Kristalltextur der Phasen haben die Duplexstähle makroskopisch anisotrope Werkstoffeigenschaften [35–41]. Zudem haben die Phasen selbst auch unterschiedliche mechanische, thermische und Diffusionseigenschaften. Daraus ergibt sich für die Phasen des Duplexstahls auch eine unterschiedliche Empfindlichkeit gegenüber einer Degradation der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff. Zumal allein aus den unterschiedlichen thermomechanischen Eigenschaften der Phasen während der Herstellung eine mechanische Beanspruchung im Gefüge resultiert, da beide Phasen unterschiedliche thermische Ausdehnungskoeffizienten besitzen. Daher sollen nachfolgend beide Einflussfaktoren in Bezug auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung zusammenhängend betrachtet werden.

### 2.2.1 Mechanische Eigenschaften und Eigenspannungen der Phasen des Duplexstahls

Im Vergleich zu rein ferritischen und rein austenitischen Stählen erreicht der Duplexstahl höhere Festigkeiten als diese Stähle selbst, *Tabelle 2.2*. Dies lässt sich über die kleinere Korngröße in den Duplexstählen erklären [27, 48]. Im Vergleich der rein austenitischen und ferritischen Stähle untereinander zeigt sich, dass die ferritischen Stähle eine höhere Fließgrenze haben als die austenitischen Stähle. Allerdings besitzen die austenitischen Stähle ein höheres Verformungsvermögen.

In zahlreichen Studien wurde das mechanische Verhalten der Duplexstähle untersucht. Die Festigkeitseigenschaften der einzelnen Phasen werden häufig mit dem Verhalten rein ferritischer und rein austenitischer CrNi-Stähle verglichen und erklärt. Dennoch besteht oft Uneinigkeit darüber, welche Phase des Duplexstahls die festere von beiden ist. So wird zum Beispiel in der Arbeit von Johansson et al. [36] über Beugungsexperimente und Mikrohärtteeindringprüfung eine höhere Festigkeit (Fließgrenze) für die austenitische Phase festgestellt. Die Autoren Moverare und Odén [37] bestätigen dieses Verhalten und führen die höhere Festigkeit des Austenits auf die kleinere Korngröße und den höheren Stickstoffgehalt zurück. In den Untersuchungen von Harjo et al. [56, 57] wird über Neutronen- und Röntgenbeugungsexperimente an spannungsfreien Referenzproben beobachtet, dass die austenitische Phase früher plastifiziert als die ferritische Phase. Auch in Versuchen mit tieflinigen Legierungen ist zu sehen, dass der Werkstoff mit abnehmenden  $\delta$ -Ferritgehalten früher anfängt zu fließen [49, 50]. In der Arbeit von Dakhloui et al. [58, 59] wird der ferritischen Phase eine höhere Fließgrenze zugesprochen. Zudem wird festgestellt, dass mit zunehmenden Gehalten an Chrom, Molybdän und Stickstoff die Härte in beiden Phasen zunimmt und immer eine etwas höhere Mikrohärtigkeit im  $\delta$ -Ferrit vorliegt. In Zug- und Druckversuchen an einem Duplexstahl wird ermittelt, dass sich die Mikrofließgrenzen beider Phasen in den Druck- und Zugversuchen voneinander unterscheiden [58, 59]. Makroskopisch können aber

zwischen Zug und Druck keine gravierenden Unterschiede ausgemacht werden. Unabhängig von der Beanspruchung des Duplexstahls auf Zug oder Druck, konnte für die ferritische Phase stets eine höhere 0,2 % Dehngrenze festgestellt werden. Die Autoren Nilsson und Chai [60] geben an, dass die Festigkeit der ferritischen Phase mit steigenden Gehalten an intermetallischen Ausscheidungen zunimmt. Horvath et al. [52] beschrieben, dass Stickstoff die Festigkeit in beiden Phasen durch Mischkristallbildung und zusätzlich im  $\delta$ -Ferrit durch Ausscheidung von Nitriden steigert. Die Korngröße, der Legierungsgehalt der einzelnen Phasen (insbesondere Stickstoff [51]), aber auch der Fertigungsprozess sowie Stützeffekte zwischen den Phasen, deren Textur und Ausscheidungen spielen für das mechanische Verhalten eine große Rolle. In der Arbeit von Marinelli et al. [61] kann experimentell festgestellt werden, dass auch die kristallographische Orientierung der Körner in den Phasen und auch die Orientierung der Phasen untereinander einen entscheidenden Einfluss auf das Verformungsverhalten der Phasen hat.

Der Einfluss der Kristallorientierung auf die Gitterdehnung wird auch in der Arbeit von Hedström et al. [62] bestätigt. Die Autoren untersuchen die Wechselwirkung der Spannungen und Dehnungen einzelner Körner in den Phasen und zwischen den Phasen auf die Lastverteilung im Gefüge. Es wird beschrieben, dass die vorliegenden Eigenspannungen in den Phasen sowie die Verfestigung der einzelnen Körner die Spannungs-Dehnungs-Wechselwirkung zwischen den Körnern in einer Phase und zwischen den Phasen selbst beeinflusst. Dabei wird auch berichtet, dass  $\delta$ -Ferrit durch Bildung von Versetzungszellen bei höheren Dehnungen eine stärkere Verfestigung erfahren kann [62]. Solch eine texturale Verfestigung wird auch in anderen Arbeiten zum mechanischen Verhalten von Duplexstählen bestätigt [35–41]. Zudem trägt die Kristalltextur der Phasen neben der zeitigen Gefügeorientierung zur makroskopischen Anisotropie der mechanischen Eigenschaften bei.

Auch sind Oberflächeneffekte zu berücksichtigen, wie es zum Beispiel in Beugungsexperimenten von Peng et al. [63, 64] festgestellt wurde. Hier zeigte sich, dass oberflächennah Druckspannungen vorlagen, die sich durch Zugspannungen in der Probenmitte ausglich. In den Beugungsexperimenten wird zudem festgestellt, dass im inneren der Probe die austenitische Phase zuerst der plastischen Verformung unterliegt. Hingegen wird für die oberflächennahe Schicht plastisches Fließen zuerst in der ferritischen Phase festgestellt. Auch Harjo et al. [56] weisen in ihren Experimenten auf einen oberflächennahen Spannungsgradienten hin. Zu bemerken ist, dass in Beugungsexperimenten meist nur oberflächennahe Messungen durchgeführt werden. Auch Messungen im Volumen sind möglich, jedoch ist der Versuchsaufbau aufwendiger und es werden leistungsfähigere Strahlenquellen benötigt. Für die Beugungsexperimente wird zumeist ein ebener Spannungszustand vorausgesetzt, der aber bei dickeren Proben mit zunehmender Eindringtiefe nicht mehr gegeben ist. Deshalb ist die Beachtung der Spannungen in alle drei Raumrichtungen für eindeutige Aussagen notwendig [56, 57].

Einigkeit besteht in der Literatur darüber, dass durch das Abschrecken nach dem Lösungsglühen, bedingt durch die unterschiedlichen thermischen Ausdehnungskoeffizienten, in der austenitischen Phase Zugeigenspannungen und in der ferritischen Phase Druckeigenspannungen vorliegen [36, 37, 56, 58, 65], die makroskopisch im Gleichgewicht stehen. Die Höhe der thermisch bedingten Eigenspannungen wird jedoch mit unterschiedlichen Werten angegeben. Siegmund et al. [65] messen Druckeigenspannungen in Höhe von 352 MPa in der ferritischen Phase eines Duplexstahls nach mehreren thermischen Zyklen. Zugeigen-



spannungen in gleicher Höhe werden für die austenitische Phase gemessen. Harjo et al. [56] ermitteln in ihren Versuchen an spannungsfreien Referenzproben thermisch bedingte Druck- und Zugeigenspannungen in Höhe von 500 MPa für die ferritische und austenitische Phase. Auch geringere Werte werden von anderen Autoren gemessen [36, 37, 58]. Allen gemein ist die Aussage des Vorliegens von Druckspannungen im  $\delta$ -Ferrit, welche durch gleichhohe Zugspannungen im Austenit kompensiert werden. Auch wird zumeist in der Literatur konsistent der austenitischen Phase ein höheres plastisches Verformungsvermögen zugesprochen [36, 57].

Die unterschiedlichen Aussagen zur Höhe der Eigenspannungen in den Phasen hängen wiederum von Faktoren wie der Korngröße, die Herstellungshistorie und in gewisser Weise auch vom Messprinzip ab. Allein durch die unterschiedlichen aus der Abkühlung resultierenden Eigenspannungen in den Phasen werden die Lastverteilung sowie das mechanische Verhalten der Phasen selbst beeinflusst.

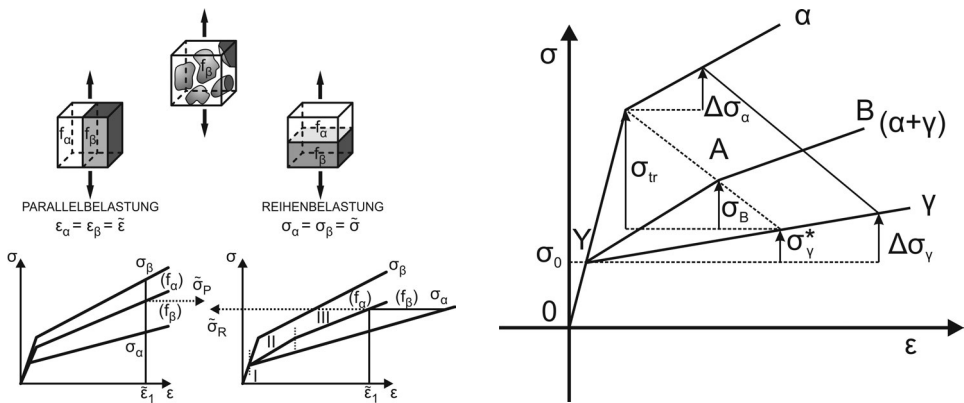
Es ist aus der Literatur zu erkennen, dass das mechanische Verhalten der Phasen, die Lastverteilung zwischen den Phasen sowie die daraus resultierende Beeinflussung des mechanischen Verhaltens von unterschiedlichen Randbedingungen abhängt und different diskutiert und quantifiziert wird. Zusammenfassend ist festzuhalten, dass ohne eine genaue Analyse der chemischen Zusammensetzung, der Korngröße, der Kristalltexturen, dem Gehalt an Ausscheidungen sowie ohne die Quantifizierung der vorliegenden thermisch bedingten Eigenspannungen in den Phasen keine eindeutigen bzw. nur qualitative Aussagen zum mechanischen Verhalten der Phasen selbst und deren Einfluss auf das makroskopische Verhalten getroffen werden können. Die Ermittlung und Quantifizierung der Werte ist zumeist nur mit sehr aufwendigen Experimenten zu erreichen, welche auch gewissen Randbedingungen unterliegen. Zudem kann eine kleine Veränderung der oben genannten Einflussfaktoren das mechanische Verhalten der einzelnen Phase und somit die Wechselwirkung der Phasen untereinander verändern.

### **2.2.2 Theoretisches Modell und numerische Simulation des mechanischen Verhaltens der Phasen**

Zur mathematischen Erfassung der Wechselwirkung der Phasen und deren Einfluss auf das globale mechanische Verhalten der Duplexstähle sind in der Literatur verschiedene Modelle zu finden. Diese beruhen zumeist auf sehr einfachen Annahmen und Versuchen das makroskopische Verhalten des Duplexstahls über die mechanischen Eigenschaften der beiden Phasen zu beschreiben. Dabei ist es wichtig, für die Wechselwirkungen im Gefüge die Interaktion in den Phasen selbst sowie zwischen den Phasen zu berücksichtigen. Dies ist mit dem Konzept der Kontiguität von Gurland [66] möglich. Das Konzept dient der Beschreibung der möglichen Wechselwirkungen in einem zweiphasigen Gefüge unter Berücksichtigung der freien Weglänge in den Phasen und dem Grad des Zusammenhangs zwischen den Phasen (Kontiguität). Die Wechselwirkungen zwischen den Körnern in den einzelnen Phasen und die Interaktion der beiden Phasen untereinander lassen sich somit in Abhängigkeit von ihren Anteilen im Gefüge, deren Form und Anordnung mit einbeziehen.

Ein sehr einfaches Modell zur Beschreibung des makroskopischen mechanischen Verhaltens über das mechanische Verhalten der beiden Phasen ist das von Tamura et al. [50] publizierte „modified law of mixture“. Mit dieser Mischungsregel ist es möglich, die makro-

skopischen Spannungen und Dehnungen über die mittleren Spannungen und Dehnungen in den Phasen und deren Phasenanteile zu beschreiben. Das modified law of mixture wurde auch von Cho und Gurland [67] für die Berechnung der plastischen Verformung in einem Duplexstahl mit 60 %  $\delta$ -Ferrit angewendet. Darüber hinaus beschreiben Cho und Gurland [67], unabhängig davon welche Gefügephase die höheren Festigkeitseigenschaften hat, dass sich die mechanischen Wechselwirkungen der Phasen untereinander in drei Bereiche einteilen lassen. Wobei von den Autoren und auch in der Arbeit von Harjo et al. [57], die das Modell für die Beschreibung der mechanischen Wechselwirkung der Phasen aufgreifen, davon ausgegangen wird, dass  $\delta$ -Ferrit die festere und Austenit die weichere, duktilere Phase ist. Auch Fischmeister und Karlsson [68] greifen die Mischungsregel von Tamura et al. [50] sowie das Konzept der Kontiguität [66] zur Beschreibung des mechanischen Verhaltens eines ferritisch-perlitischen Stahls auf und unterteilen drei verschiedene Verformungsbereiche, *Abbildung 2.5*.



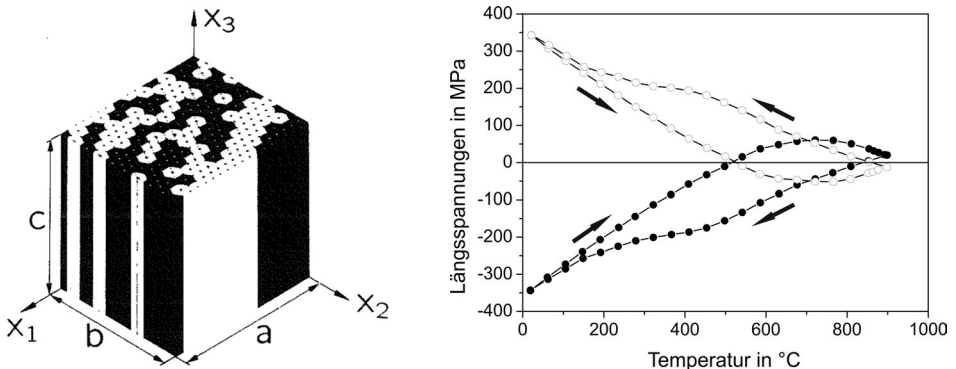
*Abbildung 2.5: Modelle zur Beschreibung der Spannungen und Dehnungen in zweiphasigen Gefügen nach Fischmeister und Karlsson [68] (links) sowie Cho und Gurland [67] (rechts)*

Im ersten Bereich verhalten sich beide Phasen elastisch und können über ein lineares Verhältnis beschrieben werden. Im zweiten Bereich verformt sich die weichere Phase, hier Austenit, plastisch, während  $\delta$ -Ferrit weiterhin elastisch bleibt. Dadurch steigt die Dehnung im  $\delta$ -Ferrit mit zunehmender Belastung schneller an [57]. Hingegen wird im Austenit ein weniger starker Anstieg der Dehnung mit zunehmender Belastung verzeichnet. Im dritten Bereich fängt auch die ferritische Phase an zu fließen, was wieder einen schnelleren Anstieg der Dehnungen im Austenit mit zunehmender Belastung zur Folge hat. Harjo et al. [57] bemerken jedoch, dass bei plastischer Verformung beider Phasen des Duplexstahls, die Zunahme der Dehnungen in beiden Phasen mit zunehmender äußerer Belastung etwa gleich groß ist. Zudem bemerken die Autoren von [68], dass die weichere Phase immer die größere Verformung und die härtere Phase die höhere Spannung erfährt. Auch Dakhlaoui et al. [58] können in ihren Experimenten ein solches Verhalten der Phasen für verschiedene Duplexstähle feststellen.

In der Arbeit von Ankem et al. [69] wird darauf hingewiesen, dass sich die Eigenschaften der Phasen und des Werkstoffes nur im elastischen Bereich mit solch einfachen Modellen beschreiben lassen. Im elastisch-plastischen und im plastischen Bereich reichen diese Modelle nicht mehr aus, um das Verhalten der Phasen abzubilden, da hier komplexere

Interaktionen zwischen den Phasen auftreten und die Spannungen und Dehnungen sehr inhomogen in den Phasen verteilt sein können. So ist es zum Beispiel möglich, dass Verformungsmechanismen, wie eine Zwillingsbildung oder eine martensitische Umwandlung vorkommen, die in den einzelnen Phasen ohne eine gegenseitige Wechselwirkung nicht zwangsweise auftreten müssen. Ankem et al. [69] erläutern deshalb, dass sich solch komplexe Wechselwirkungen, auch in Bezug auf eine mögliche Rissbildung, nur über die Finite-Elemente-Methode (FEM) detailliert abbilden lassen.

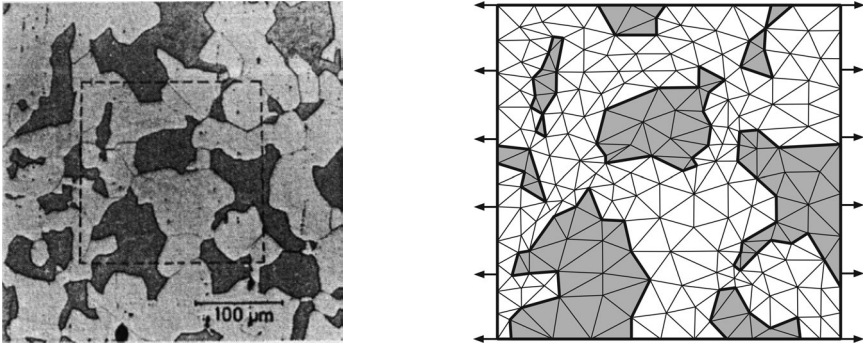
Aufbauend auf diesen einfachen Gesetzen und unter Berücksichtigung der Kontiguität nutzen Siegmund et al. [65] ein einfaches, idealisiertes Finite-Elemente Modell zur Berechnung der Spannungen und Dehnungen in den Phasen eines Duplexstahls nach mehreren thermischen Zyklen. Das Modell repräsentiert eine Einheitszelle und besteht aus einer Reihe periodisch angeordneter Zellen für  $\delta$ -Ferrit und Austenit, *Abbildung 2.6*. Ihre Ergebnisse zeigen, dass  $\delta$ -Ferrit bei höheren Temperaturen bevorzugt plastisch verformt wird und bei geringeren Temperaturen die austenitische Phase bevorzugt fließt. Zudem berechnen sie für die ferritische Phase Druckeigenspannungen und für die austenitische Phase Zugeigenspannungen nach vollständiger Abkühlung des Duplexstahls auf Raumtemperatur. In weiterführenden Arbeiten untersuchen die Autoren den Einfluss unterschiedlicher Volumenanteile an Austenit und  $\delta$ -Ferrit sowie deren Anordnung im Gefüge auf die thermische Eigenspannungsbildung [70]. Es konnte mit dem Modell gezeigt werden, dass in der zur aktuellen Temperatur festeren Phase, unabhängig ob austenitisch oder ferritisch, nur eine sehr geringe plastische Verformung stattfindet und nur die weichere Phase eine starke plastische Verformung aufweist.



*Abbildung 2.6: Dreidimensionale Darstellung eines Quadranten der Einheitszelle für die Finite-Elemente-Berechnung und Verlauf der Spannungen in der austenitischen (○) und ferritischen (●) Phase während eines thermischen Zyklus 20-900-20  $^{\circ}\text{C}$  [65]*

Eutebach et al. [71] nutzen ein ähnlich einfaches Finite-Elemente (FE) Modell zur Berechnung der thermisch bedingten Eigenspannungen in einem Duplexstahl. Zudem berechnen sie das Verhalten eines Duplexstahls unter äußerer mechanischer Last. Dafür werden über Zugversuche Spannungs-Dehnungs-Kurven für die austenitische und ferritische Phase mit Stählen ähnlicher chemischer Zusammensetzung ermittelt. Diese Werkstoffkennwerte werden dann als Eingabewerte für die FE-Analyse genutzt, um eine globale Kurve für den Duplexstahl zu berechnen.

In der Arbeit von Fischmeister und Karlsson [68] werden bereits in den 70er Jahren mit Hilfe der FEM Spannungs- und Dehnungsverteilungen in einem ferritisch-martensitischen Gefüge berechnet, *Abbildung 2.7*. Zur Erstellung des zweidimensionalen Modells nutzen die Autoren einen Mikroschliff des Gefüges. Zur Durchführung der Berechnung werden für beide Phasen Ferrit und Martensit entsprechende Werkstoffkennwerte der Einzelphasen (E-Modul, Fließgrenze und Verfestigungsrate) verwendet, wobei linear isotrope Verfestigung angenommen wird. Obgleich der einfachen Annahmen für das Materialverhalten, finden die Autoren eine gute Übereinstimmung zwischen der berechneten und experimentell ermittelten Spannungs-Dehnungs Kurve. Zudem sind Aussagen zum mechanischen Verhalten der einzelnen Phasen möglich.



*Abbildung 2.7: FEM-Modell eines Realgefüges, Ferrit + Martensit (30 %) [68]*

Das Modell lässt erkennen, dass sich im makroskopisch elastischen Bereich an den Ecken der steiferen Phase Spannungsspitzen ausbilden. Diese Spannungsspitzen führen zu Erhöhung der elastischen Dehnung in der weicheren Phase, was wiederum zu einem früheren plastischen Fließen in diesen Bereichen als im einphasigen Werkstoff führt. Dadurch werden die Spannungsspitzen wieder abgebaut, aber die inhomogenen Dehnungen bleiben erhalten [68]. Neben dem Verformungsverhalten wird auch der Einfluss der Form der eingeschlossenen martensitischen Phase untersucht. Dazu wurden die scharfen Kanten der Phase ausgerundet, was zu einer gleichmäßigeren Verformung in der Matrix führt. Die Autoren geben an, dass sich die eingeschlossenen Teilchen entgegengesetzt verhalten. Je unregelmäßiger die eingeschlossenen Teilchen geformt sind, desto früher findet eine plastische Verformung statt. Dabei werden abstehende Partien der Phase (also schmale oder kleine Bereiche) mit der Matrix mitgezogen und beginnen sich plastisch zu verformen. Zu diesen Betrachtungen konstatieren Fischmeister und Karlsson [68], dass sich mit der Mischungsregel nach Tamura et al. [50] in erster Näherung brauchbare pragmatische Aussagen zum Verformungsverhalten zweiphasiger Gefüge treffen lassen.

Auch in den Simulationen von Liao et al. [72] kann eine gute Übereinstimmung der simulierten und gemessenen Eigenschaften für einen witterungsbeständigen, ferritisch-martensitischen Duplexstahl festgestellt werden. Die Autoren nutzen ebenfalls eine zweidimensionale Nachbildung des Realgefüges und geben entsprechende Werkstoffkennwerte der Phasen vor.

In der Arbeit von El Bartali et al. [73, 74] werden numerisch ermittelte Dehnungen mit experimentell, über digitale Bildkorrelation ermittelte Dehnungen verglichen. Für den hier verwendeten austenitisch-ferritischen Duplexstahl ließen sich gute qualitative Übereinstimmungen feststellen. Für die numerischen Berechnungen der Dehnungen wurden ein dreidimensionales Modell der Realstruktur sowie kristallographische Werkstoffkennwerte (Kristallorientierung, Gleitebenen, Versetzungsdichten) für die austenitische und die ferritische Phase verwendet. Die Autoren stellen fest, dass die austenitische Phase des Duplexstahls zuerst plastisch verformt wird. Zudem geben die Autoren an, dass sich bessere Übereinstimmungen der Ergebnisse erzielen lassen, wenn periodische Randbedingungen und kinematische Verfestigung der Gefügephasen angenommen werden.

Johansson et al. [36] nutzen in ihren Untersuchungen ein zweidimensionales Modell des Realgefüges und ein einfaches dreidimensionales numerisches Modell eines Duplexstahls. Sie berechnen die Spannungs- und Dehnungs-Entwicklung in den Phasen und vergleichen sie mit röntgenografisch ermittelten Werten. In ihren Simulationen verwenden die Autoren berechnete orthotrope Werkstoffkennwerte für die Phasen und fitten über ein Potenzgesetz Spannungs-Dehnungs-Kurven, so dass die sich ergebende makroskopische Kurve der im Zugversuch ermittelten Kurve des Duplexstahls entspricht. Dabei wird der austenitischen Phase eine höhere Festigkeit zugesprochen und die ferritische Phase plastiziert zuerst. Für die Auswertung der Spannungen in den Phasen werden diese mit dem Volumen des entsprechenden Elements gewichtet und so die mittlere Phasenspannung ermittelt. Da die thermisch bedingten Eigenspannungen hochgradig hydrostatisch sind, können diese im zweidimensionalen Modell nicht berücksichtigt werden, merken die Autoren an. Dennoch lassen sich qualitative Aussagen zur Spannungs- und Dehnungs-Verteilung im Gefüge treffen, *Abbildung 2.8*.

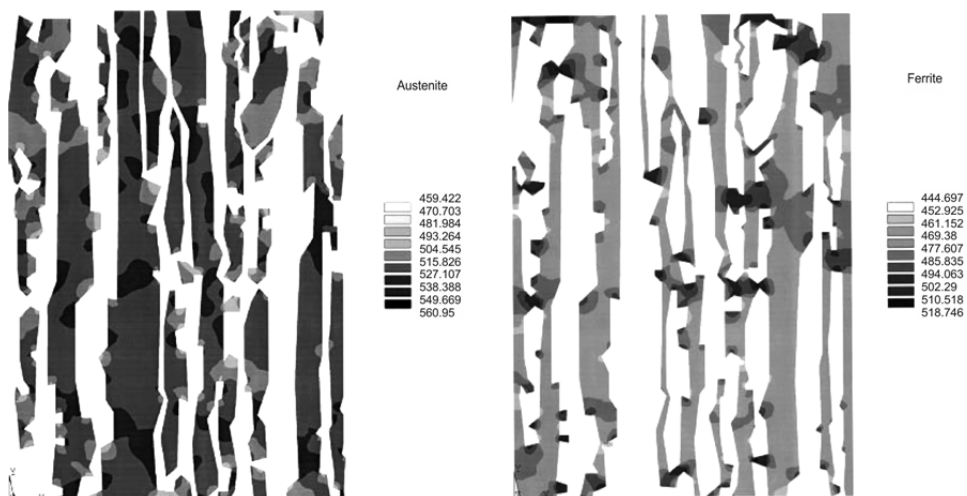


Abbildung 2.8: Berechnete Phasenspannungen im Austenit (links) und  $\delta$ -Ferrit (rechts) [36]

Johansson et al. [36] beschreiben hohe Spannungen im  $\delta$ -Ferrit nahe der Phasengrenze zum Austenit. In der austenitischen Phase sind hingegen hohe Spannungskonzentrationen in schmalen Bereichen des Austenits zu finden. Für die Berechnungen mit dem dreidimensionalen Modell wurden die thermischen Eigenspannungen berücksichtigt. Die numerischen Ergebnisse der Phasenspannungen quer zur Walzrichtung sind etwas höher als die gemessenen Spannungen der Phasen. Die Autoren führen die Abweichung auf die sich ergebende plastische Anisotropie der Phasen in unterschiedliche Richtungen durch die plastische Verformung während des Abkühlens zurück. Im numerischen Modell konnte nach der Abkühlung keine plastische Verformung der Phasen festgestellt werden. Zudem treten bedingt durch die Textur der Phasen unterschiedlich hohe Verformungen in Walzrichtung und quer zur Walzrichtung auf und der ferritischen Phase wird in Querrichtung eine höhere scheinbare Fließgrenze zugesprochen als in Walzrichtung.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass bereits im Ausgangszustand des Gefüges thermisch bedingte Druckspannungen im  $\delta$ -Ferrit und Zugspannungen im Austenit vorhanden sind, die miteinander im Gleichgewicht stehen. Diese beeinflussen auch das mechanische Verhalten der Phasen und somit auch deren Wechselwirkung untereinander. Die mechanischen Eigenschaften der Phasen werden in der Literatur kontrovers diskutiert. Einmal wird der ferritischen und ein anderes Mal der austenitischen Phase die höhere Festigkeit zugesprochen. Das mechanische Verhalten der Phasen ist jedoch abhängig von der Korngröße, Kristalltextur und -orientierung, Ausscheidungen sowie der Anordnung, Größe und Stützeffekte der Phasen.

Mit der einfachen Mischungsregel von Tamura et al. [50] lässt sich in erster Näherung sehr einfach die Spannungs- und Dehnungs-Verteilung in den Phasen beschreiben. Für eine genauere Analyse des mechanischen Verhaltens der Duplexstähle ist jedoch nur die Finite-Elemente-Methode geeignet. Hier wurde eine Reihe von numerischen Analysen durchgeführt, bei denen unterschiedliche Randbedingungen Berücksichtigung fanden. Die berechneten Ergebnisse zeigten zumeist qualitativ, zum Teil auch quantitativ gute Übereinstimmung mit experimentell ermittelten Werten.

Unabhängig von diesen Betrachtungen ist festzuhalten, dass wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigungen weniger von der Höhe der vorliegenden Spannungen beeinflusst werden. Wasserstoff degradiert die mechanischen Eigenschaften eines Werkstoffes eher, indem er das Verformungsvermögen des Werkstoffes herabsetzt, so dass sich die Zugfestigkeit der 0,2 % Dehngrenze annähert [12]. Der Werkstoff hat dann keine Duktilitätsreserven mehr und kann ohne plastische Verformung versagen. Deshalb ein dehnungsbezogener Wert als Kriterium bzw. die Duktilität ein besseres Maß für die schädigende Wirkung von Wasserstoff als die vorliegenden Spannungen [12, 75]. Es ist also wichtig, dass die vorliegenden Dehnungen in den Phasen qualitativ und quantitativ numerisch abgebildet werden können. Natürlich beeinflussen die mechanischen Eigenschaften der Phasen und die Spannungsverteilung in den Gefügebereichen auch die Dehnungen, jedoch ist das Verformungsvermögen der ferritischen Phase begrenzt und nicht so stark ausgeprägt wie in der austenitischen Phase. Deshalb muss unter Einfluss von Wasserstoff damit gerechnet werden, dass die ferritische Phase empfindlicher reagiert und zuerst versagt. Zudem im  $\delta$ -Ferrit, bedingt durch das Wasserstofftransportverhalten und das geringe Lösungsvermögen, schneller hohe und somit risskritische Wasserstoffkonzentrationen erreicht werden können.

Werden die Ergebnisse von Harjo et al. [56, 57] zugrunde gelegt, so ist zu erkennen, dass im Fall einer geringeren Fließgrenze bzw. im Fall des früheren Plastizierens von Austenit verstärkt mit einer Rissbildung in der ferritischen Phase zu rechnen ist. Fängt der Austenit eher an plastisch zu fließen, so wird die Beanspruchung im  $\delta$ -Ferrit erhöht und mit zunehmender makroskopischer Belastung steigen die Dehnungen im  $\delta$ -Ferrit schneller an. Dadurch wird die Dehngrenze im  $\delta$ -Ferrit viel früher erreicht und es kann unter Einfluss von Wasserstoff schon eher zum Versagen kommen.

Generell ist zur Beurteilung von Schadensfällen und deren Vermeidung sowie für die Übertragbarkeit von Ergebnissen zwischen Laborversuchen und realen Bauteilen die Nutzung einfacher und abgesicherter numerischer Modelle vorzuziehen [12]. Zudem sind Experimente zur Bestimmung phasenspezifischer Spannungen und Dehnungen sowie die Bestimmung von kristallplastischen Werkstoffkennwerten meist sehr aufwendig und an entsprechende Randbedingungen geknüpft. Die entsprechenden Kennwerte sind dann mit einfachen ingenieurtechnischen Methoden nicht mehr ermittelbar.

### 2.3 Grundlagen wasserstoffunterstützter Werkstoffschäden

In der Literatur wird für die schädigende Wirkung des Wasserstoffs in Metallen oft der Begriff „Hydrogen Embrittlement“ („Wasserstoffversprödung“) verwendet [12, 76–79] und meint die durch Wasserstoff hervorgerufene Abnahme der Duktilität des Werkstoffes. Mit diesem Begriff lässt sich jedoch nicht die Vielzahl der schädlichen Werkstoffbeeinflussungen und Mechanismen in Abhängigkeit des Wasserstoffangebots beschreiben [12], *Abbildung 2.9*. Deshalb wird von Böllinghaus [12] für eine einheitliche Terminologie in der Werkstoff- und Schweißtechnik der Begriff der „wasserstoffunterstützten (engl.: Hydrogen-Assisted) Schädigung von Metallen“ vorgeschlagen. Dieser Begriff wird für diese Arbeit übernommen.

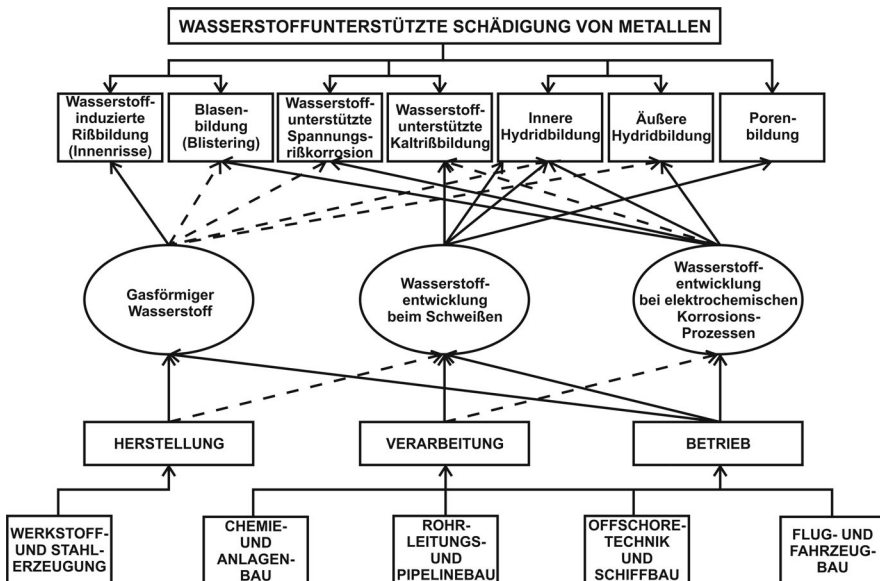
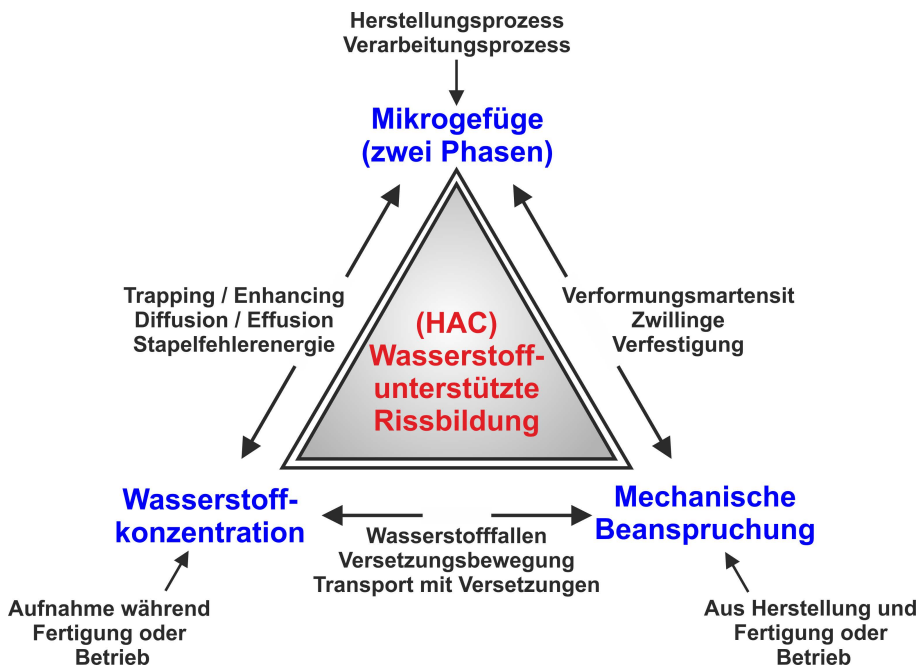


Abbildung 2.9: Übersicht der wichtigsten wasserstoffunterstützten Schäden in Metallen [12]

Nach *Abbildung 2.9* lassen sich die wasserstoffunterstützten Schadensformen unabhängig vom Wasserstoffangebot aus der Herstellung, der Fertigung oder im Betrieb einordnen [12]. So ist also zu unterscheiden, ob der Wasserstoff bereits im Werkstoff vorliegt bzw. während der Fertigung (z.B. Schweißen) oder im Betrieb (z.B. Korrosionsprozess) in den Werkstoff eingebracht wird. Die Art des Wasserstoffangebots hat einen maßgeblichen Einfluss auf die Schadensform. Hierdurch wird die Menge an bereitgestelltem Wasserstoff sowie die Verteilung der Wasserstoffkonzentration im Werkstoff und somit seine (lokale) Wirkung bestimmt [12]. Kommt es während der Herstellung, in der Fertigung oder im Betrieb zu einer Aufnahme von Wasserstoff, so kann dieser direkt am Ort der Aufnahme zu einer Werkstoffschädigung führen oder in kritische Bereiche des Werkstoffs (z.B. Bereiche hoher Beanspruchung oder spröde Werkstoffgefüge) transportiert werden und dort auch verzögert eine Werkstoffschädigung hervorrufen. Der Transport von Wasserstoff in einem festen Metall ist dabei an bestimmte Randbedingungen geknüpft, wie z.B. Kristallform, Trapping oder Enhancing und Umgebungsbedingungen (Temperatur, Druck).

Wie auch aus den zuvor erwähnten Schadensfällen ersichtlich ist, treten wasserstoffunterstützte Werkstoffschäden in den seltensten Fällen allein durch die Aufnahme von Wasserstoff auf. Vielmehr hat das vorliegende Gefüge mit seinen spezifischen mechanischen Eigenschaften und nicht zuletzt die Höhe der vorliegenden Beanspruchung des Gefüges, einen entscheidenden Einfluss auf die wasserstoffunterstützte Rissbildung (engl.: Hydrogen-Assisted Cracking – HAC). Daher sind wasserstoffunterstützte Werkstoffschäden im Dreieck Werkstoff (Mikrogefüge), Konstruktion (Beanspruchung) und Verfahren (Wasserstoffkonzentration und Beanspruchung), in Abhängigkeit des Auftretens von Bauteilschäden in der Fertigung oder während des Betriebes einzuordnen, *Abbildung 2.10*.



*Abbildung 2.10: Einflussfaktoren auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung*



Eine Rissbildung in metallischen Bauteilen findet demnach statt, wenn eine gewisse Beanspruchung im lokal vorliegenden Gefüge überschritten wird. Hierbei kann die Beanspruchbarkeit des Gefüges durch Wasserstoff herabgesetzt sein. Deshalb gilt es, bei der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung grundsätzlich alle drei Einflussgrößen

- Lokale Wasserstoffkonzentration
- Lokale mechanische Beanspruchung
- Lokales Gefüge

zu berücksichtigen [12]. Ohne das Zusammenwirken dieser Einflussgrößen tritt keine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung auf.

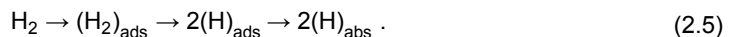
Im Folgenden wird auf die Einflussfaktoren der HAC näher eingegangen und in Bezug auf Duplexstähle näher erläutert. Dazu gilt es zunächst das Transportverhalten von Wasserstoff zu beschreiben. Im Weiteren werden die Mechanismen der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung sowie der Ort der Rissentstehung und deren Erscheinungsbild beleuchtet.

### 2.3.1 Wasserstofftransport im festen Metall

Der Transport von Wasserstoff im festen Metall gliedert sich in drei Bereiche; die Aufnahme, die Diffusion und die Effusion von Wasserstoff. Dabei sind die einzelnen Teilschritte an unterschiedliche Randbedingungen geknüpft. Folgend werden die Bedingungen für die Wasserstoffaufnahme in das Metall sowie für die Diffusion und Effusion näher beschrieben.

#### 2.3.1.1 Wasserstoffaufnahme und -löslichkeit

Die Wasserstoffaufnahme lässt sich im Wesentlichen durch drei Teilschritte beschreiben und umfasst den Transport des Wasserstoffs aus dem umgebenden Medium an die Metalloberfläche, die Adsorption des atomaren Wasserstoffs an der Oberfläche und die Absorption des Wasserstoffs in das Metall [12], *Gleichung (2.5)*:



Der zur Metalloberfläche transportierte molekulare ( $\text{H}_2$ , gasförmiges Medium) bzw. atomare Wasserstoff (z.B.  $\text{H}^+$ , Elektrolyt) wird an dieser adsorbiert, wobei molekularer Wasserstoff zunächst dissoziieren muss bevor er in das Metall übergehen kann. Der adsorbierte atomare Wasserstoff kann dann vom Metall absorbiert werden. Jedoch besteht auch die Möglichkeit, dass zwei adsorbierte Wasserstoffatome zu molekularem Wasserstoff rekombinieren und von der Metalloberfläche desorbieren. Dieser Vorgang lässt sich durch den Volmer-Tafel Mechanismus, *Gleichung (2.6)*, oder den Volmer-Heyrowsky Mechanismus, *Gleichung (2.7)*, beschreiben.



Das Gleichgewicht zwischen Absorption und Rekombination des adsorbierten Wasserstoffs ist dabei vom chemischen Potential des im Medium ( $\mu_{\text{H}_2}$ ) und im Metall ( $\mu_{\text{H}_{\text{ads}}}$ ) vorhandenen Wasserstoffs, dem Metall, der Metalloberfläche, der Temperatur ( $T$ ) und des Wasserstoff-

partialdruckes ( $p_{\text{H}_2}$ ) abhängig [12, 80–83]. Dieses Gleichgewicht kann durch das Vorhandensein von Promotoren, wie z.B.  $\text{H}_2\text{S}$  [84],  $\text{CO}$  und  $\text{CO}_2$  [85] und anderen Verbindungen mit Elementen der V und VI Hauptgruppe des Periodensystems (P, As, Sb, S, Se, Te) [82, 86] zugunsten der Absorption beeinflusst werden, da diese Elemente die Rekombination des adsorbierten Wasserstoffs erschweren. Der letztlich atomar im Metallgitter gelöste Wasserstoff lässt sich nach Sievert [87] für niedrige Konzentrationen vereinfacht über folgende Beziehung beschreiben, *Gleichung (2.8)*.

$$\text{HD} = k \cdot \sqrt{p_{\text{H}_2}} \quad \text{mit } k = e^{\frac{\Delta G}{RT}} [\text{wt.-%}], \quad (2.8)$$

mit HD: atomare Wasserstoffkonzentration im Metall,  $\Delta G$ : Reaktionsenthalpie, R: universelle Gaskonstante und T: absolute Temperatur. Das Gesetz von Sievert besitzt jedoch nur für die Aufnahme von zweiatomig gasförmig angebotenen Wasserstoff in festem Metall Gültigkeit [87].

Im Fall der Duplexstähle ist die Aufnahme von Wasserstoff über ein Korrosionsprozess im Betrieb (z.B. durch kathodischen Schutz oder in Biofilmen [16, 55]) oder während der schweißtechnischen Fertigung [88–91] möglich. Auf eine detaillierte Darstellung der Wasserstoffaufnahme aus unterschiedlichen Medien wird hier verzichtet und auf die Zusammenfassung zu den Mechanismen der Wasserstoffaufnahme aus unterschiedlichen Medien und Methoden zur mathematischen Beschreibung der Vorgänge von Böllinghaus [12] verwiesen. Numerisch lässt sich die Aufnahme von Wasserstoff über eine Robin Randbedingung unter Nutzung eines Übergangskoeffizienten [92] oder, bei bekannter absorbiertem Wasserstoffkonzentration, über eine Dirichlet Randbedingung formulieren [12].

Der aufgenommene atomare Wasserstoff wird im Metall als chemisch kleinstes Element auf den Zwischengitterplätzen interstitiell gelöst und bildet somit Mischkristalle [93]. In *Abbildung 2.11* sind die tetraedrischen und oktaedrischen Zwischengitterplätze für ein kubisch-flächenzentriertes (kfz) und ein kubisch-raumzentriertes (krz) Kristallgitter dargestellt [94]. Im krz Gitter wird Wasserstoff bevorzugt auf den tetraedrischen [95, 96] und im kfz Gitter auf den oktaedrischen Zwischengitterplätzen gelöst [96, 97].

Die unterschiedliche Besetzung der Zwischengitterplätze in den beiden Kristallformen ergibt sich aus dem jeweiligen Platzangebot für Wasserstoff. Im kubisch-flächenzentrierten Kristallgitter bieten die oktaedrischen Zwischengitterplätze und im kubisch-raumzentrierten Kristallgitter die tetraedrischen Zwischengitterplätze mehr Raum für die Einlagerung von Wasserstoff. Durch Einsetzen der Gitterparameter für krz Gitter ( $a_0 \sim 2,87 \text{ \AA}$ ) bzw. kfz Gitter ( $a_0 \sim 3,65 \text{ \AA}$ ) ergibt sich für die tetraedrischen Zwischengitterplätze im krz Gitter ein Wert von  $\sim 0,37 \text{ \AA}$  und für die oktaedrischen Plätze im kfz Gitter ein Wert von  $\sim 0,55 \text{ \AA}$ . Somit ist im kfz Gitter mehr Platz für die Einlagerung von Wasserstoff vorhanden, was das größere Lösungsvermögen des kfz Gitters gegenüber dem krz Gitters erklärt. Durch die höhere Packungsdichte im kfz-Kristall mit vier Atomen im Gegensatz zum krz-Gitter mit zwei Atomen pro kubische Einheitszelle ist jedoch das Diffusionsvermögen von Wasserstoff im krz-Gitter höher. Für die Duplexstähle bedeutet dies ein höheres Lösungsvermögen von Wasserstoff in der austenitischen Phase des Werkstoffes.

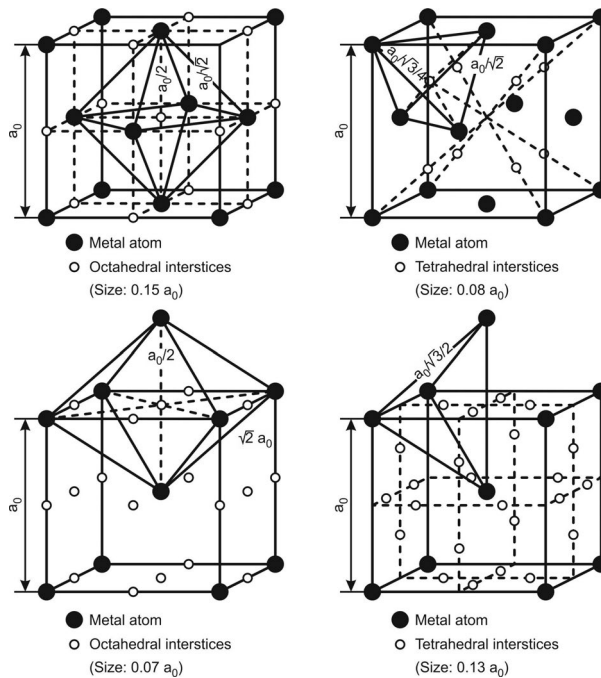


Abbildung 2.11: Okta- und Tetraeder Zwischengitterplätze im kfz (oben) und im krz (unten) Gitter [94]

Über diese Beobachtungen hinaus wurde von Oriani [98] festgestellt, dass der atomare Wasserstoff sein Valenzelektron an die 3d-Schale des Eisens abgibt und als Proton im Metallgitter vorliegt. Durch diese Wechselwirkung kommt es zu einer Änderung der elektronischen Ladungsdichte und des elektrischen Widerstandes. Der elektrische Widerstand ändert sich infolge einer Gitterverzerrung, hervorgerufen durch die Abstoßung des Wasserstoffprotons von ebenfalls positiv geladenen Metallionen [98]. Von Baranovski et al. [99] konnte festgestellt werden, dass die Einlagerung des Wasserstoffatoms in einem krz Gitter eine Volumendehnung des Gitters von ca.  $3 \text{ \AA}^3$  bedingt. Zusammenfassend wird von Fukai [97] berichtet, dass die Volumenänderung des Gitters von der Besetzung der tetraedischen und oktaedrischen Plätze abhängig ist und die Besetzung der tetraedischen Zwischengitterplätze in der Regel eine größere Volumendehnung und somit größere Verspannung des Kristallgitters hervorruft.

Für ein reines Kristallgitter lässt sich mit diesen Betrachtungen die Löslichkeit für Wasserstoff sehr gut beschreiben. In realen technischen Legierungen kann die Löslichkeit für Wasserstoff jedoch weitaus höher sein, da Leerstellen, Versetzungen und Fremdatome durch Gitterlücken oder Verzerrung bzw. Weitung des Kristallgitters zusätzlichen Platz für Wasserstoff schaffen. Auch Korn- und Phasengrenzen bieten zusätzlichen Raum für die Einlagerung von Wasserstoff [12, 81, 100]. Zudem können äußere Randbedingungen den Wasserstoffgehalt beeinflussen. So ist die Wasserstoffaufnahme im Schweißprozess [101, 102] mit nachfolgender Gefügeumwandlung häufig mit einem übersättigten Schweißnahtgefüge verbunden [12, 103], da die Löslichkeit für Wasserstoff mit sinkender Temperatur abnimmt.

2.3.1.2 Diffusion

Die Diffusion ist der wichtigste Teilschritt des Wasserstofftransports, da hier die Menge und Geschwindigkeit des Wasserstoffs bestimmt wird, welcher letztendlich für die Schädigung im Gefüge verantwortlich ist [12].

Die Diffusion des Wasserstoffs ist die Relativbewegung der Wasserstoffatome auf den Zwischengitterplätzen im Kristallgitter. Die Bewegung des Atoms ist durch Sprünge zwischen den oktaedrischen bzw. tetraedischen Plätzen charakterisiert [104]. Mathematisch wird diese Bewegung durch die Fickschen Gesetze beschrieben. Das erste Ficksche Gesetz beschreibt den zum Konzentrationsgefälle proportionalen Stoffstrom von Wasserstoff im Kristallgitter, Gleichung (2.9):

$$J = -D\nabla C = -\left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} + D_z \frac{\partial C}{\partial z}\right), \tag{2.9}$$

mit J: Stofffluss im Raum, D: Proportionalitätsfaktor (Diffusionskoeffizient oder Diffusivität) und  $\nabla C$ : Gradientenvektor der Konzentration. Der Gradient  $\nabla C$  gibt die Richtung der größten Konzentrationsänderung an und zeigt in die entgegengesetzte Richtung vom Vektor J, Abbildung 2.12. Der Stofffluss J gibt die Anzahl der Teilchen wieder, die in einer bestimmten Zeit durch eine senkrecht zum Diffusionsstrom J stehende Fläche diffundieren. Bei Betrachtung der Diffusion in nur einer Raumrichtung wird daraus:

$$J_x = -D_x \frac{\partial C}{\partial x}, \tag{2.10}$$

mit  $\frac{\partial C}{\partial x}$ : das örtliche Konzentrationsgefälle.

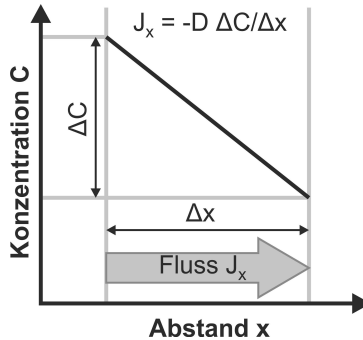


Abbildung 2.12: Schematische Darstellung des ersten Fickschen Gesetzes [104]

Das erste Ficksche Gesetz ist analog zum Fourierschen Gesetz für den Wärmestrom [104], Gleichung (2.11):

$$J_q = -\kappa \nabla T, \tag{2.11}$$

mit  $J_q$ : Wärmestrom,  $\kappa$  Wärmeleitfähigkeit und T: Temperatur.

Das erste Ficksche Gesetz gilt nur für den Fall der räumlich stationären Diffusion, d.h., das Konzentrationsgefälle  $\frac{\partial C}{\partial x}$  bleibt während der Diffusion konstant. Zur Beschreibung einer zeitlich veränderlichen Diffusion, d.h., als Folge eines Konzentrationsausgleiches variiert die Konzentration als Funktion von Ort und Zeit, muss die Kontinuitätsgleichung Berücksichtigung finden [104]. Dabei entspricht die zeitliche Änderung der Konzentration im Kristallgitter der Divergenz des Wasserstoffstromes, *Gleichung (2.12)*:

$$-\nabla \cdot \mathbf{J} = -\left(\frac{\partial J_x}{\partial x} + \frac{\partial J_y}{\partial y} + \frac{\partial J_z}{\partial z}\right) = \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (2.12)$$

Durch Einsetzen des ersten Fickschen Gesetzes (*Gleichung (2.9)*) in die Kontinuitätsgleichung (*Gleichung (2.12)*) ergibt sich das zweite Ficksche Gesetz, auch Diffusionsgleichung genannt [104], *Gleichung (2.13)*:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla \cdot (D \nabla C) = -\nabla \cdot \mathbf{J}. \quad (2.13)$$

Das zweite Ficksche Gesetz ist eine Differentialgleichung zweiter Ordnung. Hängt der Diffusionskoeffizient von der Konzentration ab, so ist diese Gleichung nichtlinear [104]. Für den Fall, dass der Diffusionskoeffizient von der Konzentration unabhängig ist, vereinfacht sich die *Gleichung (2.13)* zu:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \Delta C = D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right). \quad (2.14)$$

Die *Gleichung (2.14)* wird auch als lineare Diffusionsgleichung bezeichnet [104] und ist eine lineare Differentialgleichung zweiter Ordnung für das Konzentrationsfeld  $C(x,y,z,t)$ , mit dem Laplace-Operator  $\Delta$ .

Durch Ersetzen der Wasserstoffkonzentration  $C$  mit der Temperatur  $\vartheta$ , des Diffusionskoeffizienten  $D$  mit der Wärmeleitfähigkeit  $\kappa$ , Gleichsetzen der Dichte  $\rho$  und der Wärmekapazität  $c_p$  mit eins sowie der Annahme, dass keine zusätzliche Wärmequelle oder -senke existiert, lässt sich die Analogie des zweiten Fickschen Gesetzes zur Fourierschen Wärmeleitungsdifferentialgleichung herstellen, *Gleichung (2.15)*:

$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{\partial \vartheta}{\partial t} = \kappa \Delta \vartheta = \kappa \left( \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \vartheta}{\partial z^2} \right). \quad (2.15)$$

In allen Gleichungen repräsentiert  $D$  die Diffusionskonstante (Diffusionskoeffizient oder Diffusivität), welche die Geschwindigkeit der Diffusion charakterisiert. Der Diffusionskoeffizient lässt sich über die Arrhenius Beziehung beschreiben [104], welche die starke Temperaturabhängigkeit der Diffusivität widerspiegelt, *Gleichung (2.16)*:

$$D = D_0 \cdot e^{-\frac{E_A}{k_B T}}, \quad (2.16)$$

mit  $D_0$ : stoffabhängige Konstante (Gitterdiffusionskoeffizient im idealen Gitter) und  $e^{-\frac{E_A}{k_B T}}$ : der Boltzmann-Faktor, der die Wahrscheinlichkeit für ein Teilchen erfasst, einen Platzwechsel nach einem bestimmten Mechanismus durchzuführen, mit  $E_A$ : Aktivierungsenergie,  $k_B$ : Boltzmann-Konstante und  $T$ : absolute Temperatur. Für diesen Platzwechsel muss eine gewisse Aktivierungsenergie  $E_A$  aufgebracht werden.

Völkl und Alefeld [105] geben zum Beispiel für die Gitterdiffusion von Wasserstoff in  $\alpha$ -Eisen einen durchschnittlichen Wert von  $D_0 = 7,5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  und eine Aktivierungsenergie von  $E_A = 6,658 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$  ( $U = 0,105 \text{ eV}$ ) an. Darüber lässt sich für den Temperaturbereich von Raumtemperatur bis zur Umwandlungstemperatur in  $\gamma$ -Eisen der Diffusionskoeffizient für reines  $\alpha$ -Eisen bestimmen. Die Autoren erläutern, dass der Diffusionskoeffizient für Temperaturen unterhalb von  $250 \text{ }^\circ\text{C}$  stark zu streuen anfängt und führen dies auf die diffusionshemmenden Einflüsse im Kristallgitter (Wasserstofffallen) zurück.

Die bisherigen Betrachtungen zu den Diffusionsgesetzen sind jedoch nur für die Diffusion von Wasserstoff in einem fehlerfreien Kristallgitter gültig. In der Realität ist das Kristallgitter in einer technischen Metalllegierung meist heterogen und mit zahlreichen unterschiedlichen Gitterdefekten belegt, welche die Wanderung von Wasserstoff durch das Gitter behindern oder beschleunigen können. Diese Vorgänge werden im englischen Sprachgebrauch als „Trapping“-Effekte bzw. „Enhancing“-Effekte bezeichnet [12]. Zur Berücksichtigung solcher Effekte müssen die Fickschen Gesetze entsprechend mathematisch erweitert werden. In den folgenden Kapiteln sollen deshalb die diffusionshemmenden (Trapping) und diffusionsfördernden (Enhancing) Effekte näher erläutert werden.

In Bezug auf die Duplexstähle ist hier festzuhalten, dass die Diffusion von Wasserstoff vom vorliegenden Gefüge und dessen Anordnung abhängig ist [106, 107]. Der Diffusionskoeffizient von Wasserstoff in  $\text{krz}$ -Gittern ist um einige Größenordnungen höher als in  $\text{kfz}$ -Gittern, bedingt durch die unterschiedliche Packungsdichte der Zellen und die Größe der Zwischengitterplätze. Deshalb diffundiert der Wasserstoff im  $\delta$ -Ferrit weitaus schneller und der Transport von Wasserstoff im Duplexstahl wird durch die Diffusion im  $\delta$ -Ferrit bestimmt [106, 107]. Andere Autoren [108–110] bestätigen dies mit der Mikroprint-Technik [111]. Nach kurzer Beladungszeit lässt sich Wasserstoff im  $\delta$ -Ferrit jedoch nicht im Austenit nachweisen.

Für die Gefügestruktur einer Schweißnaht ist, bedingt durch die Morphologie der austenitischen und ferritischen Phase, ein anderes Wasserstofftransportverhalten zu erwarten [90, 112–115]. Zudem können zusätzlich Ausscheidungen im Schweißgut, wie z.B. Nitride [44, 112], die Diffusion beeinflussen, da sie als Wasserstofffallen fungieren.

### 2.3.1.3 Trapping

Die meisten polykristallinen Metalllegierungen haben eine heterogene Gefügestruktur und ihr Kristallgitter ist durchsetzt von Gitterfehlern. Solche Gitterunregelmäßigkeiten werden meist als Falle (engl.: Trap) bezeichnet [12], da sie den Wasserstoff einfangen und festsetzen können. Dieser Vorgang wird im Folgenden als Trapping bezeichnet. In *Abbildung 2.13* sind verschiedene im Kristallgitter vorliegende Gitterunregelmäßigkeiten, an denen Wasserstoff festgesetzt werden kann, schematisch dargestellt [12].

In der Arbeit von Pressouyre [116] wird eine Einteilung unterschiedlicher Wasserstofffallen nach Größe des Gitterdefektes vorgenommen:

- Punktdefekte: Leerstellen, Substitutions- oder Fremdatome
- Liniendefekte: Schrauben- oder Linienversetzungen, Knotenpunkt dreier Korngrenzen

- 2D-Defekte: Korn-, Phasen- oder Zwillingsgrenzen, Partikel-Matrix Grenzflächen, innere Oberflächen
- 3D-Defekte: Volumendefekte wie Hohlräume, Mikroporen, Mikrorisse oder Partikel

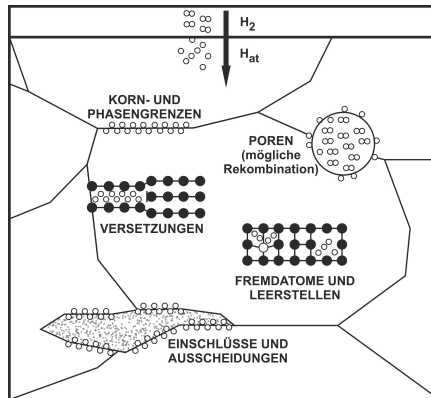


Abbildung 2.13: Schematische Darstellung von Wasserstofffallen in Metallen [12]

Durch das Festsetzen von Wasserstoff in Fallen wird dieser dem Diffusionsgeschehen entzogen und nimmt nicht weiter an der aktuellen Diffusion teil. Der festgesetzte Wasserstoff wird daher auch als residualer Wasserstoff bezeichnet [12]. McNabb und Foster [117], Oriani [93] und McLellan [118] unterscheiden Wasserstofffallen erstmalig über eine Energiedifferenz zwischen der Falle  $E_{B \text{ Falle}}$  und dem Energieniveau des Gitters  $E_{\text{Gitter}}$ , *Abbildung 2.14*. Dabei wird angenommen, dass der Wasserstoff im Gitter (Y) mit dem Wasserstoff in den Fallen (X) lokal im Gleichgewicht ist und keine Interaktion zwischen den Atomen in der Falle und im Gitter besteht.

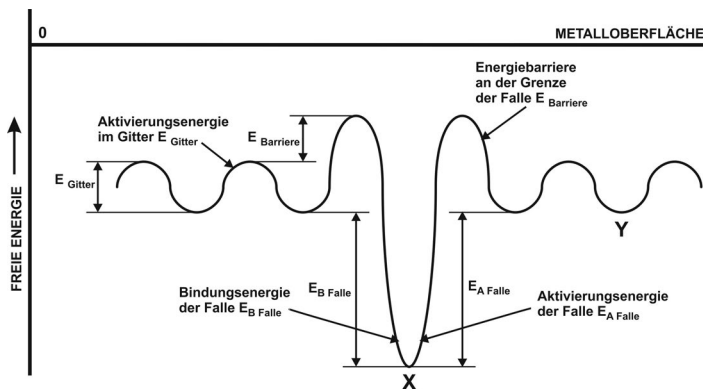


Abbildung 2.14: Schematische Darstellung einer Wasserstofffalle nach Oriani [93] und McLellan [118], aus [12]

Diese Definition lässt zu, dass der in der Falle (X) festgehaltene Wasserstoff durch Zufuhr einer ausreichend hohen Aktivierungsenergie  $E_{A \text{ Falle}}$  aus der Falle entweichen und somit wieder an der Gitterdiffusion teilnehmen kann. Die Autoren McNabb und Foster [117] unterscheiden in ihren mathematischen Berechnungen erstmals unterschiedlich stark getrappten

Wasserstoff bzw. unterschiedlich tiefe Wasserstofffallen. Eine Übersicht zu den mathematischen Modellen zur Erfassung diffusionshemmender Effekte ist in [12] zu finden.

In Anlehnung an die energetische Betrachtung von Wasserstofffallen der zuvor genannten Autoren unterscheidet Pressouyre [116] in seiner Arbeit drei unterschiedliche Fallentypen in Abhängigkeit der Aktivierungsenergie, *Abbildung 2.15*.

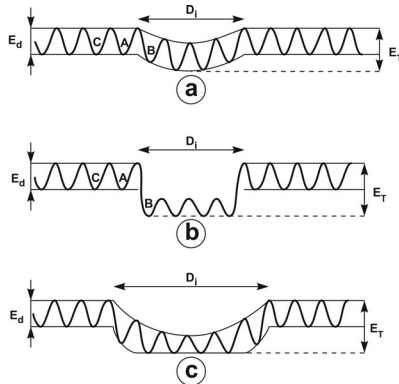


Abbildung 2.15: Schematische Darstellung verschiedener Wasserstofffallen [116]

Der erste Fallentyp ist in *Abbildung 2.15a* zu sehen und wird von Pressouyre als attraktive Falle bezeichnet. Attraktive Fallen in metallischen Strukturwerkstoffen können elektrische Felder, Spannungsgradienten, Temperaturgradienten oder Unterschiede im chemischen Potential sein. So können zum Beispiel Spannungsfelder um Versetzungen, kohärente und semikohärente Korngrenzen, Partikel oder Verzerrungen vor einer Rissspitze Wasserstoff der Diffusion entziehen und in ihrer Mitte festsetzen. Für die Freisetzung des getrappten Wasserstoffs ist dann eine etwas höhere Energie nötig, wie für die reine Gitterdiffusion selbst [116].

Als zweites beschreibt Pressouyre Fallen, die durch eine Modifikation des Kristallgitters entstehen, wie zum Beispiel Leerstellen, Poren, Grenzflächen an inkohärenten Ausscheidungen oder auch Großwinkelkorngrenzen [116]. Dieser Fallentyp wird als physikalische Falle bezeichnet und entspricht den von Oriani [93] und McLellan [118] beschriebenen Fallen, die sich durch ein schlagartig abfallendes Energieniveau vom Energieniveau des Kristallgitters unterscheiden, *Abbildung 2.15b*. Für die Freisetzung dieses getrappten Wasserstoffs ist eine weitaus höhere Energie notwendig, damit der Wasserstoff die Falle verlassen kann.

Der am häufigsten in technischen Metalllegierungen vorkommende Fallentyp ist der von Pressouyre [116] „Mixed Trap“ genannte Fallentyp [12]. Die Mixed Traps sind eine Kombination aus attraktiven und physikalischen Fallen und wird zum Beispiel durch eine Stufenversetzung beschrieben. Der Kern der Versetzung bietet durch die Fehlstelle im Gitter viel Platz für Wasserstoff. In einem begrenzten Radius um die Versetzung herum ist das Kristallgitter durch Spannungen geweitet und bietet zusätzlichen Platz für Wasserstoff, der aber nur eine geringe Aktivierungsenergie besitzt, wie für die attraktiven Fallen beschrieben ist [116]. Prinzipiell kann jeder Gitterfehler eine Verzerrung des umliegenden Gitters bewirken und so als Mixed Trap wirken, *Abbildung 2.15c*.



In der Arbeit von Maroef et al. [119] wird der residuale Wasserstoff in Abhängigkeit von der Aktivierungsenergie in reversibel und irreversibel getrappten Wasserstoff unterteilt. Dem irreversibel getrappten Wasserstoff ist eine Aktivierungsenergie von  $E_A \geq 60 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  ( $U \geq 0,62 \text{ eV}$ ) zugeordnet [119]. Eine derartige Unterteilung erscheint jedoch nicht sinnvoll, da durch eine entsprechende thermische oder mechanische Beanspruchung des Werkstoffes dem Wasserstoff eine ausreichend hohe Energie zur Verfügung gestellt werden kann, um die Falle trotz der hohen Aktivierungsenergie zu verlassen. Diese Möglichkeit der Freisetzung von scheinbar irreversibel getrappten Wasserstoff bei entsprechend hohen Temperaturen wird auch von Maroef et al. [119] beschrieben. Dieser Wasserstoff ist dann wieder diffusibel und kann zur Schädigung des Werkstoffes beitragen. Deshalb wird in dieser Arbeit nur zwischen aktuell diffusiblem Wasserstoff und residualem Wasserstoff, der bei Erreichen einer entsprechenden Aktivierungsenergie wieder diffusibel ist, unterschieden. Für die Analyse von Schädigungsmechanismen ist prinzipiell immer der gesamte im Werkstoff vorhandene Wasserstoff zu betrachten.

Neben den Legierungselementen einer technischen Legierung, die in Abhängigkeit ihrer Größe als Substitutions- oder Einlagerungsatome bzw. durch Bildung von Ausscheidungen Wasserstofffallen bereitstellen können, kommt den Versetzungen sowie Korn- und Phasengrenzen eine besondere Bedeutung zu.

Versetzungen können im ruhenden Zustand interstitielle Atome wie Wasserstoff an sich binden [120]. Durch eine entsprechende Beanspruchung des Werkstoffes fangen Versetzungen jedoch an, durch das Kristallgitter zu wandern. Dabei kann der Wasserstoff in Abhängigkeit von der Geschwindigkeit der Versetzung mit diesen mittransportiert werden [121].

In der Literatur werden Korngrenzen sehr divergent diskutiert [122]. Zum einen werden sie häufig den Wasserstofffallen zugeordnet [77, 116, 119], da sie eine Gitterunregelmäßigkeit darstellen und somit ein erhöhtes Platzangebot für Wasserstoff bereitstellen. Andererseits können sie auch Pfade erhöhter Wasserstoffdiffusion sein [104, 123]. Jedoch ist die Beschleunigung und Hemmung der Wasserstoffdiffusion von der Geometrie der Korngrenze sowie deren Besetzung mit Ausscheidungen abhängig [124–127]. Yazdipour et al. [125, 126] und Dadfarnia et al. [127] zeigen über numerische Berechnungen, dass der Diffusionskoeffizient von einem Einkristall bis hin zu einem feinkörnigen polykristallinen Werkstoff erst leicht ansteigt und dann mit kleiner werdender Korngröße wieder zunehmend stark abfällt. Die Autorentams begründen dieses Verhalten mit der Zunahme der Korngrenzfläche pro Einheitsvolumen hin zu kleineren Korngrößen und damit verbunden eine Erhöhung der Anzahl möglicher Wasserstofffallen. Chou und Tsai [128] können mit Abnahme der Korngröße für einen Duplexstahl eine verbesserte Resistenz gegenüber einer wasserstoffunterstützten Rissbildung in ihren Slow Strain Rate Test (SSRT) Versuchen feststellen. Die Autoren begründen dieses Verhalten über die Abnahme der Diffusionsgeschwindigkeit und eine erhöhte Akkumulation von Wasserstoff an Korngrenzen. Generell stellen die Autoren eine Abnahme der Duktilität mit zunehmender Korngröße fest.

Einheitlich wird hingegen die Meinung vertreten, dass Phasengrenzen, insbesondere Einschluss-Gitter-Phasengrenzen an Karbiden und Nitriden als Fallen fungieren [122, 129–131]. Für Phasengrenzen, wie sie in Duplexwerkstoffen zwischen den Kristallgittern der austenitischen und ferritischen Phase vorkommen, gibt es jedoch auch unterschiedliche

Aussagen. Yalçi und Edmonds [132] können mit der Wasserstoff-Mikroprint-Technik [111] eine erhöhte Wasserstoffkonzentration an den Phasengrenzen feststellen und begründen dies mit Trapping. Jedoch wird von anderen Autoren [108–110] mit der gleichen Technik keine erhöhte Konzentration auf den Phasengrenzen festgestellt. Lediglich hohe Wasserstoffgehalte in der ferritischen Phase des Duplexstahls, bedingt durch das bessere Diffusionsvermögen im  $\delta$ -Ferrit. Solche Experimente sind aber auch stark von den gewählten Beladungsbedingungen und -zeiten abhängig.

Auch das Gefüge an sich hat in Abhängigkeit vom vorliegenden Kristallgitter sehr unterschiedliche Diffusionseigenschaften. Das kubisch-flächenzentrierte Gitter beispielsweise hat eine höhere Löslichkeit für Wasserstoff als das kubisch-raumzentrierte Gitter, bedingt durch die größeren Zwischengitterplätze im kfz Gitter (*Kapitel 2.3.1.1*). Jedoch ist die Diffusion in kfz Metallen aber um bis zu fünf Zehnerpotenzen niedriger als in krz Metallen [133]. Dies belegen auch Permeationsexperimente am Duplexstahl von Owczarek und Zakroczymski [107] sowie Turnbull und Hutchings [106]. Zudem berichten die Autoren [106, 107], dass die Gefügeorientierung einen bedeutenden Einfluss auf die Diffusion von Wasserstoff hat. In Permeationsexperimenten mit Proben unterschiedlicher Dicke bemerken die Autoren einen Abfall des Diffusionskoeffizienten mit zunehmender Probendicke und begründen dies mit einem verwundenen Diffusionspfad in der ferritischen Phase des Werkstoffs. Mit zunehmender Dicke muss der Wasserstoff im  $\delta$ -Ferrit um die austenitischen Inseln herum transportiert werden, was längere Diffusionswege bedingt. Turnbull und Hutchings [106] führen deshalb einen Tortuositäts-Faktor ein, um den verwundenen Diffusionsweg und somit die verzögerte Diffusion zu berücksichtigen.

Die Klassifizierung von Wasserstofffallen nach ihren Aktivierungsenergien ermöglicht die Berücksichtigung von Trapping-Effekten in der Arrhenius Beziehung (*Gleichung (2.16)*) [134]. Somit lassen sich für die Diffusionskoeffizienten Streubänder erstellen, in denen diffusionshemmende Effekte erfasst sind [122, 133]. Unter Nutzung der oberen Hüllkurve wird die ungehinderte Wasserstoffdiffusion und durch die untere Hüllkurve der „worst-case“, d.h., eine verzögerte Diffusion durch Trapping in tiefen Fallen beschrieben.

Dadurch ist es auch möglich, Trapping in numerischen Berechnungen über einen effektiv wirkenden Diffusionskoeffizienten  $D_{\text{eff}}$ , welcher die entsprechenden Aktivierungsenergien der jeweiligen Fallentypen einbezieht, zu berücksichtigen [12]. So behält das zweite Ficksche Gesetz seine allgemeine Gültigkeit für die Berechnung von Wasserstoffkonzentrationen in metallischen Werkstoffen. Eine Übersicht zu den verschiedenen Arten von Wasserstofffallen und deren zugehörigen Aktivierungs- oder Bindungsenergien für Wasserstoff ist in der Literatur zu finden [12, 77, 96, 119, 135]. Streubänder der effektiven Diffusionskoeffizienten in unterschiedlichen Gefügen sind in den Arbeiten von Böllinghaus et al. [122, 133] zu finden.

### 2.3.1.4 Enhancing

Neben den diffusionsverzögernden Effekten von Wasserstofffallen sind in der Literatur auch Theorien für eine beschleunigte Wasserstoffdiffusion zu finden. So wird zum Beispiel angenommen, dass hohe Spannungen oder Verformungen durch Weiten des Kristallgitters die Wasserstoffdiffusion unterstützen können [136–142] und der Wasserstoff neben einem Konzentrationsgradienten auch einem Spannungs- oder Verformungsgradienten folgt [12].

Die Erfassung solcher Effekte kann nach Böllinghaus [12] über die Erweiterung des Fickschen Gesetzes um ein zweites Potentialfeld erfolgen, wie es auch in [104] dargestellt wird. Nur so lässt sich die mit Enhancing-Effekten häufig in Verbindung gebrachte Ansammlung von Wasserstoff oberhalb der Ausgangskonzentration mathematisch beschreiben [12].

Eine weitere, viel in der Literatur diskutierte Form von Enhancing geht mit der plastischen Verformung des Werkstoffes einher. Mit plastischer Verformung verbunden sind die Entstehung und das Wandern von Versetzungen. Wie bereits zuvor beschrieben, kann Wasserstoff an Versetzungen als Cottrell-Atmosphäre eingefangen werden [120]. Von Troiano [143] wurde zum Beispiel bemerkt, dass Wasserstoff in der plastischen Zone vor Rissspitzen akkumuliert und so zur Schädigung des Werkstoffes beiträgt. In der Arbeit von Kiuchi und McLellan [144] wird ein Modell vorgeschlagen, demzufolge der Wasserstoff beidseitig der Versetzung in einem bestimmten Abstand zur Versetzung schneller transportiert werden kann.

Neben diesen Effekten wird von Tien et al. [121] der Transport von Wasserstoff mit Versetzungen beschrieben. Den Autoren zufolge findet eine Anreicherung von Wasserstoff im Gefüge statt, wenn der Wasserstoff von der Versetzung gelöst wird. Dies kann durch Überschreiten einer kritischen Geschwindigkeit, Auslöschung oder Interaktion der Versetzung mit Wasserstofffallen erfolgen [121]. Wird der Wasserstoff an einer reversiblen Wasserstoff-falle abgestreift, so ist es möglich, dass eine andere Versetzung diesen Wasserstoff wieder aufnehmen und weitertransportieren kann. Das Abstreifen von Wasserstoff kann auch an Korngrenzen erfolgen, an denen sich Versetzungen aufstauen. Der abgestreifte Wasserstoff kann dann von einer anderen Versetzung im Nachbarkorn wieder aufgenommen und weitertransportiert werden. Somit ist auch eine Übersättigung bestimmter Gefügebereiche mit Wasserstoff erklärbar [121]. Der maximale Radius für eine solche Interaktion wird von Tien et al. [121] mit dem dreißigfachen des Burgersvektor  $b$  angegeben. Die Menge an transportiertem Wasserstoff lässt sich über eine Boltzmann Gleichung beschreiben, ähnlich dem Diffusionskoeffizienten (*Gleichung (2.16)*), mit einer Bindungsenergie für Wasserstoff an Versetzungen. Der Mechanismus des Abstreifens und der Wiederaufnahme von Wasserstoff wird als „Dislocation Sweeping“ bezeichnet [121] und ist in *Abbildung 2.16* schematisch am Beispiel von Partikeln im Kristallgitter dargestellt.

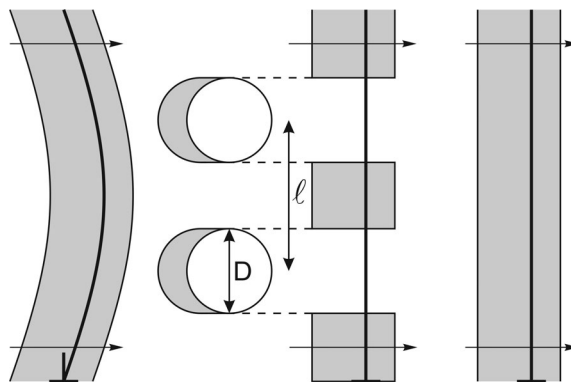


Abbildung 2.16: Schematische Darstellung des Abstreifens von Wasserstoff an eingelagerten Teilchen [121]

Ein experimenteller Nachweis des Wasserstofftransports durch Versetzungen wird von Louthan et al. [145] erbracht. Die Autoren konnten über Zugversuche mit beschichteten und unbeschichteten Zugproben in Wasserstoffatmosphäre eine Versprödung des Werkstoffes durch Wasserstoff, welcher über Versetzungen in den Werkstoff transportiert wurde nachweisen. Zudem wurde auch eine erhöhte Freisetzung von Wasserstoff mit zunehmender Zugbeanspruchung festgestellt [145].

Oltra und Bouillot et al. [146, 147] greifen diesen Mechanismus in ihren Untersuchungen an einem Duplexstahl auf und erklären somit den Rissfortschritt in der austenitischen Phase. Sie erläutern, dass Wasserstoff die Versetzungsbewegung an der Rissspitze anregt und somit Wasserstoff in die austenitische Phase transportiert wird, dort zu einer Übersättigung führt und das Fortschreiten des Risses durch den Austenit begünstigt. In Abwesenheit von Wasserstoff wurden die Risse in der austenitischen Phase arretiert, geben die Autoren an. Einen Nachweis über die erhöhte Konzentration wird mit der Messung von Deuterium über Sekundärionen-Massenspektrometrie (SIMS) erbracht.

Birnbaum und Sofronis [148] führen auf Grundlage der Interaktion von Wasserstoff mit Versetzungen den als „Hydrogen Enhanced Localized Plasticity“ (HELP) bezeichneten Mechanismus ein, der die lokale Anregung der Versetzungstätigkeit durch Wasserstoff beschreibt (*Kapitel 2.3.2*). In ihren in-situ Untersuchungen mit einem Transmissionselektronenmikroskop (TEM) konnten sie experimentell feststellen, dass Versetzungen ohne eine Erhöhung der äußeren mechanischen Beanspruchung, durch Beladung des Werkstoffes mit Wasserstoff (schneller) wandern. Wird der Wasserstoff wieder entfernt, so verlangsamt sich die Versetzungsbewegung wieder. Die erleichterte Versetzungsbewegung wird durch eine lokale Herabsetzung der Fließspannung verursacht und führt somit zu einer lokalen Entfestigung (engl. Softening) [148]. Andererseits erläutern die Autoren auch, dass für korrosionsbeständige Stähle eine Verfestigung (engl. Hardening) beobachtet werden konnte und führen dies auf eine Lokalisierung des Versetzungsgleitens auf wenige Gleitebenen zurück. Neben der Beeinflussung der Bewegung von Versetzungen durch Wasserstoff konnten die Autoren auch eine erleichterte Neubildung von Versetzungen durch Wasserstoff feststellen [148]. Robertson [149] tätigt Untersuchungen zur Wirkung von Wasserstoff auf die Versetzungsbewegung und kann die beschriebenen Wechselwirkungen (Hardening und Softening) bestätigen sowie die erleichterte Versetzungsbewegung unter Einfluss von Wasserstoff experimentell nachweisen. In ihren Arbeiten führen die Autoren Birnbaum und Sofronis [148, 150] zudem Berechnungen zur Wasserstoffakkumulation an Versetzungen durch. Auch wird die Interaktion von Versetzungen untereinander unter Einfluss von Wasserstoff erörtert. So konnte gezeigt werden, dass Wasserstoff die Spannungsfelder der Versetzungen gegeneinander abschirmt. Dadurch können Versetzungen dichter aufeinander aufrücken und es kommt zum sogenannten pile-up (Aufstau) der Versetzungen [148, 150].

Bereits vor diesen Betrachtungen haben Sofronis und McMeeking [151] ein Modell entwickelt, mit dem sich die Akkumulation von Wasserstoff in plastischen Zonen berechnen lässt. Krom et al. [152] nutzen dieses Modell und führen einen zusätzlichen Term für die plastische Dehnrates ein. Darauf aufbauend und mit eigenen Erweiterungen berechnen Sofronis et al. [153–155] die Akkumulation von Wasserstoff in plastischen Zonen sowie Bereichen hydrostatischer Spannungen vor Rissspitzen, Kerben oder an Einschlüssen und ermitteln dessen Einfluss auf die Rissbildung. Daran anknüpfend haben auch andere Autoren [22,

23, 156] solche Enhancing-Effekte bzw. die Wechselwirkung von Wasserstoff mit Versetzungen und die Akkumulation in Bereichen hoher Beanspruchung simulieren können. Sofronis et al. [154] postulieren in Bezug auf ihre numerischen und experimentellen Betrachtungen zur Wirkung von Wasserstoff in Metallen, dass sich eine Werkstoffschädigung nicht allein durch den HELP-Mechanismus beschreiben lässt sondern vielmehr durch synergetische Effekte des HELP-Mechanismus mit der Theorie der Hydrogen Enhanced Decohesion (HEDE, *Kapitel 2.3.2*) erfolgt. Auch in der Arbeit von Brocks et al. [23] ergab sich unter Berücksichtigung beider Mechanismen HEDE und HELP eine bessere Übereinstimmung der Ergebnisse von Experiment und Simulation.

Barnoush und Vehoff [157] können über die Mikrohärteeindringprüfung an einem Nickel Einkristall feststellen, dass sich die „pop-in“ Kraft unter Einfluss von Wasserstoff reduziert und erbringen damit einen experimentellen Beweis für die Interaktion von Wasserstoff mit Versetzungen. Die „pop-in“ Kraft steht in direktem Zusammenhang mit der plastischen Verformung und reflektiert die notwendige Schubspannung für das Auslösen und Wandern von Versetzungen [157]. Die Autoren erklären die Auslösung der Versetzung mit dem HEDE Mechanismus und das erleichterte Wandern der Versetzung mit dem HELP Mechanismus. Daher gehen die Autoren auch hier davon aus, dass beide Mechanismen parallel ablaufen müssen.

Wie eingangs schon betrachtet, werden Korn- und Phasengrenzen in der Literatur kontrovers diskutiert. Mehrer [104] sowie Kaur et al. [123] beschreiben Korn- und Phasengrenzen sowie Versetzungen als Pfade erhöhter Diffusion. Korn- und Phasengrenzen haben eine gewisse Dicke (5 bis 10 Å [123]) an unregelmäßig angeordneten Atomen und bieten damit mehr Platz für die Wasserstoffatome, die sehr einfach Sprünge zwischen den Plätzen ausführen können. Beschrieben wird die Diffusion entlang von Korn- und Phasengrenzen über das zweite Ficksche Gesetz (*Gleichung (2.14)*) unter Nutzung des effektiven Diffusionskoeffizienten (*Gleichung (2.16)*). Die Autoren [104, 123] geben an, dass die Aktivierungsenergie für die Diffusion entlang einer Korn- oder Phasengrenze geringer ist als für die Diffusion im Kristallgitter. Das Verhältnis der Aktivierungsenergien für die Diffusion entlang der Korn- grenze zur Diffusion im Gitter wird mit 0,4 bis 0,6 angegeben [104]. Eine Übersicht zu den Kennwerten der Diffusion entlang von Korn- und Phasengrenzen ist in [158] zu finden. Die detaillierte mathematische Beschreibung der Diffusion entlang von Pfaden erhöhter Diffusion ist in [104, 123] gegeben.

In den Arbeiten von Hirth [77], Pressouyre [116] und Maroef [119] werden Korn- und Phasengrenzen als Wasserstofffallen beschrieben. Ähnlich wie bei den Versetzungen kann Wasserstoff entlang der Korn- und Phasengrenzen zwar schneller diffundieren, jedoch wird eine erhöhte Aktivierungsenergie benötigt, damit der Wasserstoff die Korn- oder Phasengrenze verlässt und wieder im Kristallgitter diffundiert. Zudem können Versetzungen den Wasserstoff an der Korn- oder Phasengrenze aufnehmen und in die Körner oder Phasen transportieren, wie zuvor beschrieben.

Neben den oben genannten Effekten der beschleunigten Wasserstoffdiffusion gibt es noch weitere Effekte, die zu einer schnellen Anreicherung des Gefüges mit Wasserstoff beitragen können. So kann zum Beispiel eine Phasenumwandlung eine Übersättigung an Wasserstoff bedingen. Diese Art der Anreicherung eines Gefüges mit Wasserstoff ist häufig beim Schweißen zu beobachten [12, 101–103]. Die Löslichkeit im Gitter ist bei höheren Tempe-

raturen um ein vielfaches größer. Somit kann nach dem Abkühlen und evtl. Umwandlung eine erhöhte Wasserstoffkonzentration vorliegen, die entweder zu einer Porenbildung führt oder die in einem übersättigten Gefüge in Wasserstofffallen getrappt ist.

Auch denkbar ist eine Phasenumwandlung des Austenits in Martensit. Austenit hat durch das kfz-Gitter eine höhere Löslichkeit als die verzerrte krz-Zelle des  $\alpha'$ -Martensits. Zudem ist Martensit sensibler als Austenit gegenüber einer Degradation der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff [20, 21] und ein Umklappen des Austenits kann zu einem an Wasserstoff übersättigter Martensit führen. Für Duplexwerkstoffe wurde schon mehrfach gezeigt, dass die austenitische Phase durch eine Wasserstoffbeladung und/oder plastischer Verformung in Martensit umklappen [21, 159–163] und somit zu einer Werkstoffschädigung beitragen kann.

Eine detaillierte Übersicht zur mathematischen Erfassung von Trapping und Enhancing würde den Rahmen dieser Arbeit übersteigen, deshalb sei hier auf die zusammenfassende Übersicht von Böllinghaus [12] und der in diesem Kapitel genannten Literatur verwiesen. Trapping-Effekte können auf Grundlage der Theorien von McNabb und Foster [117] sowie Oriani [93] über die Aktivierungsenergie erfasst und in Streubänder für Diffusionskoeffizienten zusammengefasst werden [122, 133]. Unter der Annahme, dass kein irreversibles Trapping stattfindet, ist für einfache ingenieurstechnische Anwendungen die numerische Simulation der Wasserstoffverteilung unter Berücksichtigung des effektiven Diffusionskoeffizienten mit dem zweiten Fickschen Gesetz möglich [12, 164]. Durch Verwendung der oberen oder unteren Kurve des Streubandes kann entweder eine ungehinderte Diffusion oder Trapping in tiefen Fallen (worst-case) berücksichtigt werden.

Eine erhöhte Wasserstoffdiffusion lässt sich sehr einfach in Analogie zum Trapping über eine geringere Aktivierungsenergie [104, 123] für die Wasserstoffdiffusion im effektiven Diffusionskoeffizienten berücksichtigen. Enhancing-Effekte werden aber auch mit einer Akkumulation von Wasserstoff in Verbindung gebracht. Eine Ansammlung von Wasserstoff über die Ausgangskonzentration hinaus lässt sich jedoch nur mit der Erweiterung des zweiten Fickschen Gesetzes realisieren und es ist darauf zu achten, dass über weitere Terme keine zusätzlichen Wasserstoffquellen oder -senken implementiert werden [12]. Sofronis et al. [153–155] und andere Autoren [22, 23, 156] haben gezeigt, dass sich eine Wasserstoffakkumulation infolge plastischer Verformung oder hydrostatischen Spannungen numerisch berücksichtigen lässt. Die Implementierung solcher Effekte in ein entsprechendes Finite-Elemente-Programm zur Abbildung von Wasserstoffakkumulationen bzw. der Interaktion von Wasserstoff und plastischer Verformung ist jedoch nicht trivial, sehr aufwendig und bedingt die Erweiterung der Fickschen Gesetze [12]. Zudem werden eine Reihe zusätzlicher Werkstoffkennwerte, wie Versetzungsdichten in Abhängigkeit der plastischen Verformung und deren Besetzungsgrad durch Wasserstoff benötigt [22, 23, 153, 155]. Auch die Kenntnis der Aktivierungsenergie für die einzelnen Fallentypen ist notwendig. In der Literatur werden solche Werte jedoch zum Teil inkonsistent quantifiziert oder sind nur spärlich vorhanden. Sofronis et al. [165] erwähnen in diesem Zusammenhang auch, dass die Mechanismen des Enhancing und die damit verbundene schädigende Wirkung von Wasserstoff noch unzureichend geklärt ist und deshalb zukünftig zum Beispiel die Wasserstoffkonzentration an solchen mikrostrukturellen Merkmalen (Versetzungen, Korngrenzen, Ausscheidungen) experimentell und rechnerisch besser quantifiziert werden sollte. Dabei können zum Beispiel moderne Methoden der Werkstoffcharakterisierung wie

Sekundärionen-Massenspektrometrie [166] oder auch Neutronen- und Röntgendiffraktometrie [167–169] helfen, um die Verteilung von Wasserstoff lokal im Gefüge oder an Unregelmäßigkeiten bzw. dessen Wechselwirkung mit Spannungen und Dehnungen im Gefüge zu bestimmen. Zur Beurteilung von Schadensfällen und deren Vermeidung sollte jedoch die Simulation der Wasserstoffverteilung und Werkstoffschädigung mit einfacheren und abgesicherten Modellen, aber unter Berücksichtigung einer detaillierten Bauteilgeometrie erfolgen [12].

Die Vorangegangenen Betrachtungen zum Trapping und Enhancing stellen die Grundlagen heutiger Untersuchungen und numerischer Herangehensweisen zur Abbildung des Wasserstofftransports in Metallen sowie Wirkung von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften dar. Jüngere Literatur basiert auf diesen Erkenntnissen und versucht die beschriebenen Vorgänge numerisch [22, 23, 153–155] als auch experimentell [115, 157, 159] zu verifizieren und deren Wirkung zu quantifizieren. Dabei kommen moderne Methoden zur Werkstoffcharakterisierung [166–169] gleichsam mit numerischen Methoden zum Einsatz. Jedoch besteht weiterhin der Bedarf die Effekte von Trapping und Enhancing auf den Wasserstofftransport sowie die Wirkung des Wasserstoffs auf die Eigenschaften der Werkstoffe qualitativ und vor Allem quantitativ zu erfassen.

### 2.3.1.5 Effusion

Die Effusion von Wasserstoff ist für die Vermeidung einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung sehr wichtig. Über die Abgabe des Wasserstoffs an die Umgebung kann der Wasserstoff im Gefüge reduziert und somit die Gefahr der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung reduziert werden.

Die Effusion von Wasserstoff läuft in Analogie zur Wasserstoffaufnahme in drei Teilschritten ab [12], *Gleichung (2.17)*. Der absorbierte Wasserstoff wird über Diffusion zur Metalloberfläche transportiert und desorbiert. Der desorbierte, atomare Wasserstoff kann entweder direkt in das umgebende gasförmige Medium abgegeben werden oder es findet vor der Desorption die Rekombination in molekularen Wasserstoff statt. Bei der Abgabe in ein flüssiges Medium wird der Wasserstoff auf der Metalloberfläche unter Abgabe eines Elektrons oxidiert oder ionisiert und kann dann in den Elektrolyt übergehen [12], *Gleichung (2.18)*.



Auch bei diesen Prozessen besteht die Möglichkeit der Rekombination des Wasserstoffs an der Metalloberfläche nach dem Volmer-Tafel oder Volmer-Heyrovsky-Mechanismus.

Die Abgabe des Wasserstoffs an die Umgebung kann wie die Wasserstoffaufnahme durch verschiedene Randbedingungen beeinflusst werden. So können zum Beispiel Desorptionsplätze an der Metalloberfläche durch andere Elemente, wie Sauerstoff belegt sein [170]. Zudem sind weitere Faktoren, wie die Oberflächenrauigkeit [170], die Temperatur [171] oder Oberflächenreaktionen, die zu einer Oxidschicht führen [172, 173], für die Effusion von Bedeutung. Kiuchi und McLellan [144] betrachten die Oberfläche als tiefe Falle und berücksichtigen

sichtigen dies über eine entsprechend hohe Aktivierungsenergie für den Diffusionskoeffizienten. Zusätzlich können die Oberflächen mit Oxid- oder Passivschichten belegt sein, was den Wasserstoffaustritt erschwert [170–173].

Numerisch kann die Effusion über eine Robin Randbedingung unter Nutzung eines Übergangskoeffizienten [92, 174] oder über eine Dirichletsche Randbedingung erfolgen [12], wobei sich die Dirichletsche Randbedingung unter der Annahme der ungehinderten Effusion (Randknoten werden auf Null gesetzt) oder Abgabe in ein wasserstoffhaltiges Medium (setzen der Randknoten auf bestimmte Wasserstoffkonzentration) durchführen lässt. Im Fall einer Oxid- oder Passivschicht kann die Effusion über die Diffusion durch eine Randschicht mit entsprechendem Diffusionskoeffizienten berücksichtigt werden. Zumeist ist es aber ausreichend, eine ungehinderte Effusion des Wasserstoffs anzunehmen und die Randknoten auf Null zu setzen [12].

### 2.3.2 Mechanismen der Wasserstoffunterstützten Rissbildung

Für die Phänomenologie der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung werden in der Literatur unterschiedliche Theorien zu den Mechanismen der Schädigung durch Wasserstoff publiziert. Diese Theorien sind aber zumeist nur in der Lage, Teilaspekte der Wirkung von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften der Werkstoffe zu klären und stellen keine ganzheitliche Lösung bereit. Die Mechanismen sind unabhängig vom vorliegenden Gefüge und gelten eigentlich nur für homogene Gefüge bzw. Gefügeausschnitte. Im folgenden Abschnitt werden einzelne in der Literatur zu findende Theorien kurz erläutert.

#### Drucktheorie

Die Drucktheorie [175] ist eine der ältesten Theorien. Sie beschreibt, dass atomarer Wasserstoff an Grenzflächen von Defekten in der Mikrostruktur, wie zum Beispiel Einschlüssen, Ausscheidungen, Mikroporen oder -rissen, zu molekularem Wasserstoff rekombiniert. Die Rekombination zu molekularem Wasserstoff ist mit einer Volumenvergrößerung verbunden und führt daher zu sehr hohen, internen Drücken. Dadurch kann es oberflächennah zur Blasenbildung oder im Werkstoff zur Entstehung und Zusammenwachsen von Mikroporen und -rissen kommen. Für diese Art der Werkstoffschädigung sind sehr hohe Wasserstoffkonzentrationen nötig. Zudem tritt diese Schädigungsform häufig nur in Werkstoffen geringer Festigkeit auf.

#### Adsorptionstheorie

Die Idee der von Petch und Stables [176] entwickelten Adsorptionstheorie ist, dass der adsorbierte Wasserstoff an der Rissspitze die Oberflächenenergie herabsetzt, welche zur Bildung neuer Oberflächen während des Rissfortschritts benötigt wird. Sinkt die Trennfestigkeit des Werkstoffes unter die kritische Schubspannung an der Rissspitze, wird nach dieser Theorie die Sprödbuchbildung begünstigt. Die Anwendung dieser Theorie ist schwierig, da eine Werkstofftrennung häufig im Werkstoffinneren, in rissspitzennahen Bereichen entsteht und nicht an der Rissspitze.

#### Hydridbildung

Wasserstoff kann in Verbindung mit Metallen der IV. und V. Nebengruppe des Periodensystems, wie Titan, Zirconium, Niob, Tantal oder Vanadium spröde Hydride ausbilden [177].



Dabei kann zwischen einer inneren und äußeren Hydridbildung unterschieden werden. Die äußere Hydridbildung beinhaltet die Bildung einer spröden Schicht auf der Metalloberfläche, die bei der wasserstoffunterstützten Spannungsrisskorrosion und Nichteisenmetallen, wie Titanlegierungen eine größere Rolle spielt [178, 179].

Die Versprödung des Werkstoffes durch innere Hydridbildung ist in erster Linie mit der Spannungs- und Dehnungsinduktion durch die Volumenzunahme und der spröden Struktur der Hydride verbunden [177, 178]. Zu bemerken ist, dass sich die Hydride bevorzugt in Bereichen lokaler Deformationen und an Versetzungen bilden. Der Rissfortschritt findet dabei durch die kontinuierliche Bildung neuer Hydride und deren sprödes Versagen statt.

### Dekohäsionstheorie (engl.: Hydrogen Enhanced Decohesion – HEDE)

Im Gegensatz zur Adsorptionstheorie wird bei der von Troiano [143] und Oriani [180] entwickelten Theorie die Rissbildung im Werkstoffinneren nahe der Risspitze berücksichtigt. Demnach diffundiert der Wasserstoff in Bereiche hoher mechanischer Spannungen vor der Risspitze, wo er durch Wechselwirkungen mit dem Metallgitter die Bindungskräfte zwischen den Metallatomen herabsetzt (Abbildung 2.17).

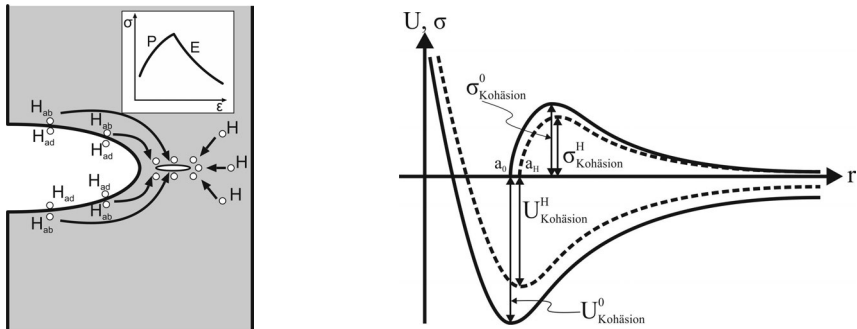


Abbildung 2.17: Schematische Darstellung der Rissentstehung nach der Dekohäsionstheorie (links [178]) und Darstellung der herabgesetzten Dekohäsionsenergie ( $U$ ) und -spannung ( $\sigma$ ) über die kritische Öffnung der Grenzfläche ( $r$ ), mit  $a_0$  – Gitterparameter (rechts [180])

Dadurch kann der Wasserstoff im Zusammenwirken mit hohen mechanischen Spannungen zu einer rein elastischen Werkstofftrennung führen. Die dekohäsive Wirkung des Wasserstoffs ist nach Troiano [143] anhand der Elektronenstruktur des Metalls zu erklären. Der atomare Wasserstoff gibt ein Elektron an die 3d-Schale des Metallatoms ab und liegt als Proton vor. Durch den Zustand erhöhter Energie nehmen die Kohäsionskräfte im Metallgitter ab.

### Plastizitätstheorie

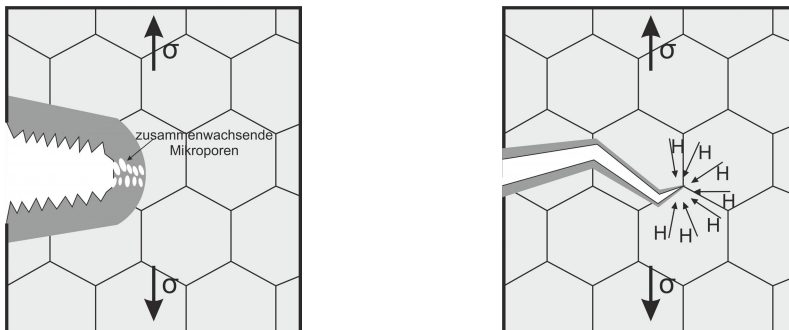
Unter diesem Begriff werden alle metallurgischen Mechanismen verstanden, bei denen Wasserstoff lokal die Plastizität des Werkstoffes beeinflusst. Die Grundannahme ist, dass sich Wasserstoff auf die Beweglichkeit der Versetzungen auswirkt [181]. Dieser Prozess ist kein direkter Versprödungsmechanismus, jedoch trägt er zur Versprödung des Werkstoffes bei. Nelson [181] beobachtete, dass der Einfluss von Wasserstoff auf die Beweglichkeit der Versetzungen einerseits eine Verfestigung (hardening effect) und andererseits eine Entfes-

tigung (softening effect) in Abhängigkeit vom Werkstoff und den Legierungselementen zur Folge haben kann.

Bei der lokalen Verfestigung wird angenommen, dass der Wasserstoff durch Diffusion in die Dilatationszone und der Ausbildung von Cottrell-Wolken [120] die Versetzungsbewegung behindert. Dadurch reduziert sich die Plastizität des Werkstoffes an der Rissspitze und die Sprödbuchbildung wird begünstigt. In [181] wird zusätzlich eine Beschleunigung des Risswachstums durch Herabsetzen der risskritischen Spannung beschrieben.

Beim „softening effect“ wird angenommen, dass Wasserstoff die Versetzungsbewegung beschleunigt. Beachem [182] konnte in experimentellen Untersuchungen an hochfesten Stählen feststellen, dass durch die erhöhte Versetzungsbewegung und das damit verbundene erhöhte Verformungsvermögen das Risswachstum begünstigt wird.

Die mit diesem Phänomen am besten einhergehende Theorie ist die von Sofronis und Birnbaum et al. [148] entwickelte Theorie des HELP (**H**ydrogen **E**nanced **L**ocalized **P**lasticity) Mechanismus. Angenommen wird, dass Wasserstoff lokal das Verformungsvermögen erhöht, indem er die Versetzungsbewegung beschleunigt. Durch die verbesserten Gleitprozesse wird die Fließgrenze herabgesetzt, begleitet von einer Abnahme der Festigkeit. Bedingt durch die hohen Spannungen vor der Rissspitze kommt es hier zum plastischen Versagen des Werkstoffes (*Abbildung 2.18*).



a) In Abwesenheit von Wasserstoff durch Zusammenwachsen von Mikroporen in der plastischen Zone

b) Unter Mitwirkung von Wasserstoff, Risswachstum als Folge lokaler erleichterter Verformung an der Rissspitze

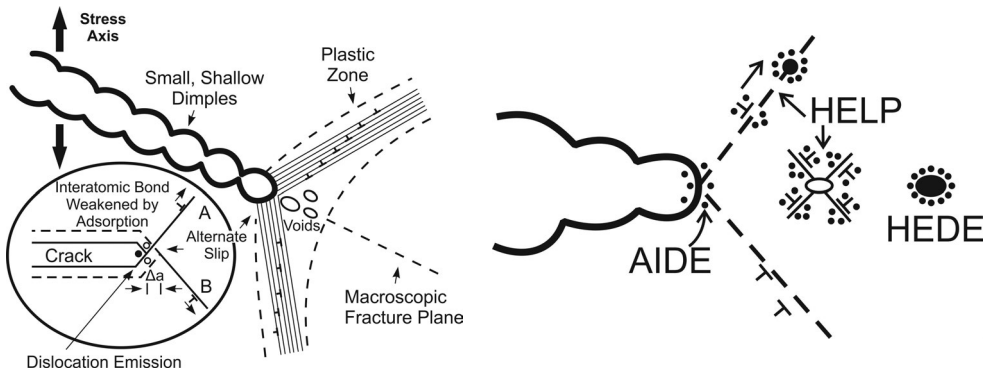
Abbildung 2.18: Schematische Darstellung des Rissfortschrittes nach dem HELP Mechanismus [25]

Prinzipiell ist aber das Auftreten beider Effekte möglich. In Abhängigkeit von der im Material vorliegenden Wasserstoffkonzentration können die Autoren Abraham und Altstetter [183] für einen austenitischen Werkstoff feststellen, dass zunächst eine Verfestigung auftritt. Mit zunehmend höheren Wasserstoffkonzentrationen geht dieser Effekt wieder verloren und es stellt sich eine Diskontinuität der Fließgrenze ein.

### Adsorptionsinduzierte Versetzungsbewegung

Der von Lynch [79] propagierte Mechanismus (**A**dsorption-**I**nduced **D**islocation **E**mmission – AIDE) nutzt die Mechanismen HEDE und HELP und ist der Plastizitätstheorie sehr ähnlich, da auch hier die Versetzungsbewegung durch Wasserstoff beeinflusst wird. Lynch beschreibt, dass der in den ersten paar Atomlagen adsorbierte Wasserstoff dort die inter-

atomare Bindung des Metallgitters schwächt und somit die Auslösung von Versetzungen erleichtert wird, *Abbildung 2.19*. Durch das lokal erleichterte Versetzungsgleiten kommt es in der plastischen Zone vor der Risspitze zur Bildung von Mikroporen und Überschneidung von Versetzungen. Wird dabei Wasserstoff mit den Versetzungen in die plastische Zone transportiert, so kommt es auch an den Mikroporen und Einschlüssen oder Ausscheidungen zur Auslösung von Versetzungen. Lynch beschreibt, dass sich mit diesem Mechanismus Quasi-Spaltbrüche als auch duktile Brüche erklären lassen.



*Abbildung 2.19: Schematische Darstellung des AIDE Mechanismus (links) und AIDE im Zusammenwirken mit HELP und HEDE (rechts) [79]*

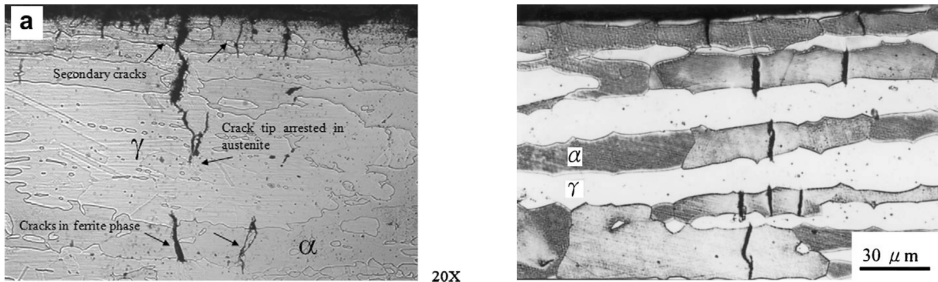
Für weitere Informationen zu diesen Mechanismen der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung wird auf die bereits genannte Literatur verwiesen.

### 2.3.3 Ort der Rissentstehung und Risserscheinung

Das Zusammenwirken der zuvor beschriebenen Einflussfaktoren kann in einem metallischen Werkstoff zu einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung führen. Die Schädigung tritt dann ein, wenn in einem gegenüber Wasserstoff empfindlichem Gefüge die durch Wasserstoff herabgesetzte lokale Beanspruchbarkeit durch eine entsprechend hohe Beanspruchung überschritten wird. Bei Betrachtung der Literatur zu wasserstoffunterstützten Werkstoffschäden wird dargestellt, dass austenitische Stähle im Vergleich weniger empfindlich gegenüber einer Degradation ihrer mechanischen Eigenschaften sind [19, 20]. Ferritische und besonders martensitische Stähle zeigen eine hohe Empfindlichkeit gegenüber Wasserstoff, bedingt durch ihr geringeres Verformungsvermögen. Hier genügen meist geringste Wasserstoffkonzentrationen im Gefüge, damit es zu einer entsprechenden Schädigung und zum Versagen kommt [19, 20, 25].

Bezüglich der austenitisch-ferritischen Duplexstähle ist festzustellen, dass eine wasserstoffunterstützte Schädigung mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit zuerst in der ferritischen Phase des Duplexstahls eintreten wird, wie es auch in zahlreichen Untersuchungen zur wasserstoffunterstützten Rissbildung in Duplexstählen beschrieben ist [12, 72, 102, 114, 130, 145, 155–160]. Diese kann dann im Folgenden auch zur Schädigung der austenitischen Phase beitragen. Bedingt durch die hohe Diffusionsgeschwindigkeit im  $\delta$ -Ferrit werden schnell ausreichend hohe Wasserstoffkonzentrationen für eine Degradation der mechanischen Eigenschaften erreicht. Zudem hat die ferritische Phase ein weitaus geringeres Ver-

formungsvermögen im Vergleich zur austenitischen Phase, so dass schon bei geringen Wasserstoffkonzentrationen eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung eintreten kann. In den zuvor genannten Untersuchungen konnte gezeigt werden, dass die Risse in der ferritischen Matrix des Duplexstahls initiieren und häufig in der austenitischen Phase arretieren [15, 110, 185, 186], *Abbildung 2.20*. Neben den Eigenschaften der Phasen selbst, hat auch deren Anordnung und Orientierung einen entscheidenden Einfluss auf das Rissverhalten des Duplexstahls [40, 188]. So können Zheng und Hardie [188] und Sharrfeddin et al. [40] eine höhere Sensibilität gegenüber einer wasserstoffunterstützten Rissbildung bei einer Belastung des Duplexstahls quer zur Walzrichtung feststellen.



*Abbildung 2.20: Mikroskopische Aufnahmen wasserstoffunterstützter Risse in Duplexstählen, Rissbildung in der ferritischen Phase und Arretierung des Risses in der austenitischen Phase [15, 186]*

In der Arbeit von Nilsson und Chai [60] wird gezeigt, dass die Risse in der ferritischen Phase bevorzugt an Korngrenzen oder an der Phasengrenze zum Austenit initiieren (*Abbildung 2.23a*). Die Autoren führen die Rissinitiation auf den Aufstau von Versetzungen an den Korn- oder Phasengrenzen zurück. Dadurch kommt es in diesen Bereichen zu hohen Spannungskonzentrationen. Zudem kann Wasserstoff mit den Versetzungen in diese Bereiche transportiert werden oder auch bereits in hohen Mengen an den Phasen- oder Korngrenzen getrappt sein. Dadurch kommt es zu Bildung von Hohlräumen, die dann als Ausgangspunkt für einen Riss fungieren. Ferner wird beschrieben, dass Wasserstoff planares Gleiten der Versetzungen im Austenit unterstützt [19]. Dadurch können sich an den Phasengrenzen Versetzungen aufstauen und zusätzlich zur Induktion hoher Spannungen und Dehnungen im  $\delta$ -Ferrit führen. Auch in der Arbeit von Marinelli et al. [61] wird die Rissbildung in der ferritischen Phase der Duplexstähle auch ohne Anwesenheit von Wasserstoff über den Versetzungsaufstau erklärt. Dabei gehen die Autoren auch auf die kristallographische Orientierung der Körner in den Phasen als auch der Phasen zueinander und deren Einfluss auf die Rissbildung ein.

San Marchi et al. [19] erklären die Rissbildung in der ferritischen Phase des Duplexstahls unter Einfluss von Wasserstoff sehr ähnlich und präsentieren ein Modell zur Beschreibung des Rissfortschrittes, *Abbildung 2.21*. Der im  $\delta$ -Ferrit initiierte Riss verursacht Spannungen und Dehnungen im Austenit, wodurch es zum Rissfortschritt durch die austenitische Phase kommt (Punkt A). Alternativ kann der Riss auch entlang der Phasengrenze fortschreiten (Punkt B). Die Risse im Austenit bzw. entlang der Phasengrenzen verbinden dann die bereits in der ferritischen Phase entstandenen Spaltbrüche miteinander, beschreiben die Autoren [19].

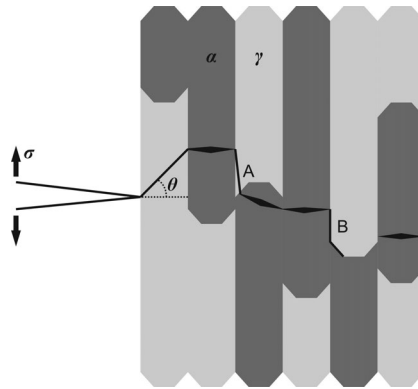


Abbildung 2.21: Schematische Darstellung des Rissfortschritts im Duplexstahl unter Wasserstoffeinfluss. Position A zeigt einen Riss durch den Austenit ( $\gamma$ ), einen alternativen Risspfad entlang der Phasengrenze ist am Punkt B zu sehen. Das mikromechanische Modell nutzt die Dehnungsverteilung in einem Winkel von  $\theta = 45^\circ$  [19]

In der Arbeit von Oltra und Bouillot [146, 147] sowie Golebiowski et al. [184] wird erklärt, dass die Risse zunächst im Austenit stoppen. In der plastischen Zone an der Risssspitze wird in der austenitischen Phase lokal die Versetzungstätigkeit angeregt und Wasserstoff aus dem  $\delta$ -Ferrit in den Austenit transportiert. Dadurch wird hier Wasserstoff angereichert und der Riss schreitet schrittweise im Austenit fort. In [184] wird für den Rissfortschritt im Duplexstahl ohne Wasserstoff keine bevorzugte Richtung des Risses und kein bevorzugter Rissfortschritt in einer Gefügephase festgestellt. Unter Einfluss von Wasserstoff geben die Autoren [184] jedoch an, dass vermehrt ein Rissfortschritt entlang der austenitisch-ferritischen Phasengrenze erfolgt. Diese Risserscheinung lässt sich mit Trapping von Wasserstoff entlang der Phasengrenzen erklären [106, 107, 187]. Das schrittweise oder von Oltra und Bouillot [146, 147] als „zickzackförmig“ beschriebene Fortschreiten des Risses im Austenit wurde von Magnin et al. [189] auch für die Rissbildung in austenitischen Stählen unter korrosivem Angriff beobachtet. Magnin et al. [189] entwickeln daraufhin das „Corrosion Enhanced Plasticity Model“ für die Spannungsrissskorrosion in kfz-Stählen, *Abbildung 2.22*. Dieser Mechanismus ist dem zuvor beschriebenen HELP-Mechanismus (Plastizitätstheorie) sehr ähnlich, jedoch wird hier explizit die Beteiligung eines Korrosionsprozesses erwähnt über den auch der Wasserstoff in den Werkstoff aufgenommen wird.

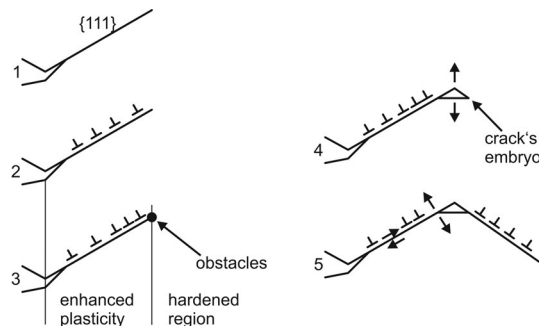
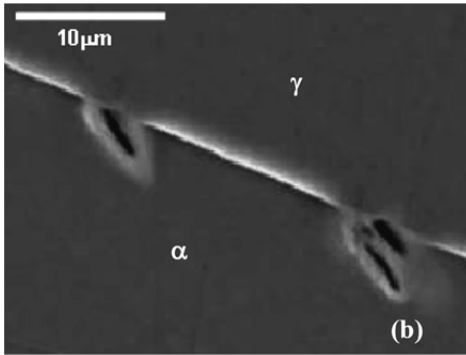


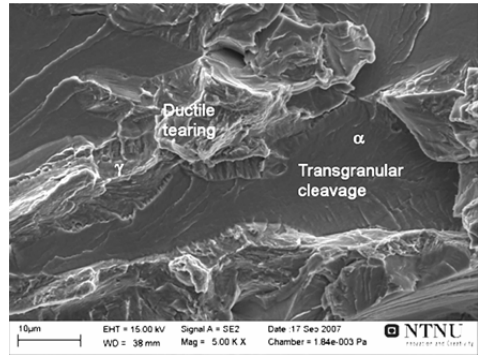
Abbildung 2.22: Schematische Darstellung der verschiedenen Stufen des „Corrosion-Enhanced Plasticity“ Modells [189]

Im ersten Schritt findet eine anodische Metallauflösung entlang der (111) Gleitebene statt. Durch eindiffundierenden Wasserstoff wird lokal, entlang dieser Ebene die Versetzungsbe-  
 wegung sowie Scherung entlang dieser Ebene erleichtert (2). Die Versetzungen werden an einem Hindernis aufgestaut (3), wodurch es zu einer Spannungskonzentration und Was-  
 serstoffanreicherung an diesem Hindernis kommt. Dadurch kann ein neuer Riss am Hin-  
 dernis entstehen (4), wodurch dann wieder entlang bestimmter Gleitebenen ( $\{111\}$ ,  $\{100\}$ ,  
 $\{110\}$ ) neue Versetzungen ausgelöst werden (5). Entlang dieser Gleitebenen schreitet der  
 Riss zickzackförmig fort [189].

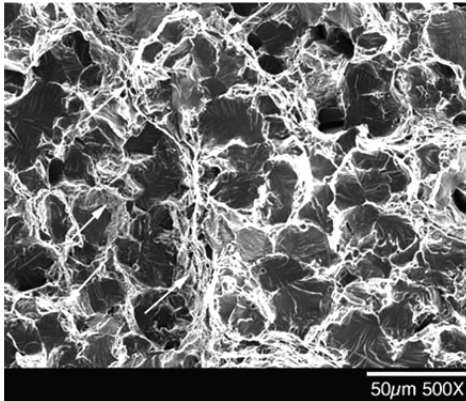
Fraktographisch lassen sich die wasserstoffunterstützten Risse in Duplexstählen durch  
 einen transkristallinen Quasispaltbruch beschreiben, *Abbildung 2.23*. Wobei in Abhängig-  
 keit von der lokalen Wasserstoffkonzentration und Dehngeschwindigkeit auch duktile Anteil-  
 e auf der Bruchfläche zu finden sind [15, 19, 54, 75, 110, 160, 186, 190, 191].



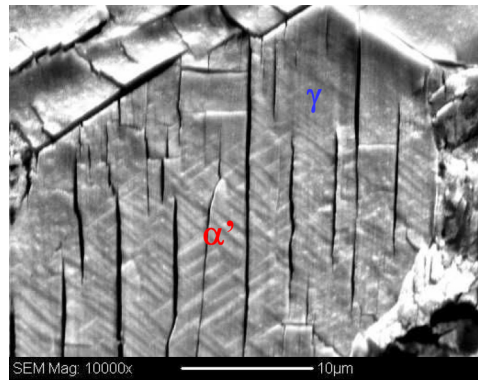
a) Initiierung von Mikrorissen an der Phasengren-  
 ze [60]



b) Transkristalliner Spaltbruch im  $\delta$ -Ferrit ( $\alpha$ ),  
 duktile Trennung im Austenit ( $\gamma$ ) [54]



c) Spaltbrüche im  $\delta$ -Ferrit getrennt durch  
 duktilere Bereiche (Pfeile) [19]



d) Parallele Rissbildung im Austenit durch  
 martensitische Umwandlung [161]

*Abbildung 2.23: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von Risserscheinungen in Duplexstäh-  
 len [19, 60, 110, 161]*

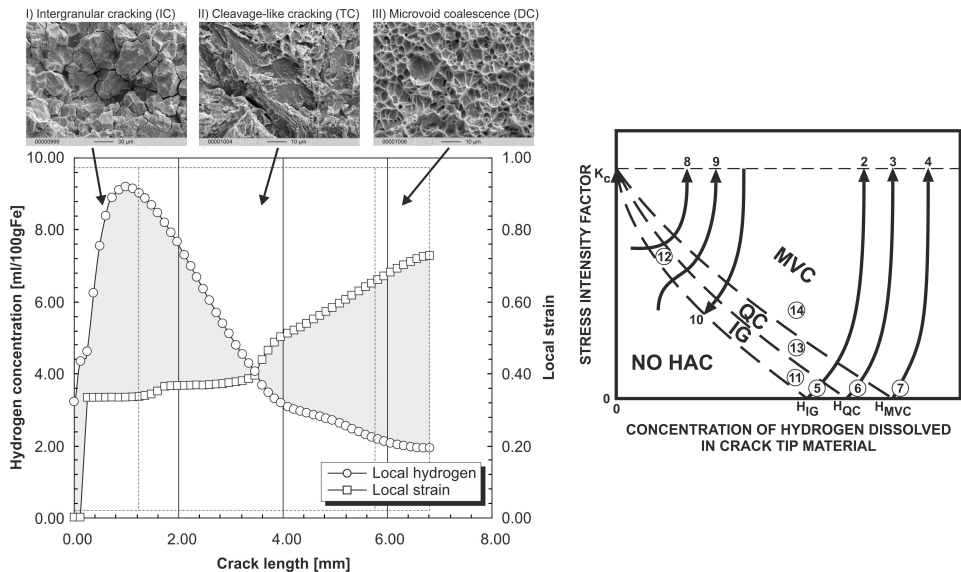
Die duktileren Anteile der Bruchfläche werden zumeist mit dem Rissfortschritt in der austenitischen Phase oder entlang der Phasengrenze assoziiert. Häufig beschreibt die Literatur die duktilen Risse im Austenit auch mit einem kammförmigen, schrittweise gerissenen Trennbruch mit plastischer Verformung [19, 54], *Abbildung 2.23b* und *Abbildung 2.23c*.

Bei den Duplexstählen besteht auch die Möglichkeit, dass durch hohe Dehnungen und Wasserstoffkonzentrationen eine Martensitbildung in der austenitischen Phase bevorzugt an der Risspitze stattfindet [75, 160, 161, 184]. Glowacka et al. [161] beschreiben eine martensitische Umwandlung des Austenits, allein durch eine Beladung mit Wasserstoff. Schon kurz nach dem Beginn der Beladung mit Wasserstoff konnten die Autoren bereits eine Erhöhung der Stapelfehler im Gefüge feststellen. Zudem beobachteten die Autoren an der Oberfläche des Werkstoffes eine parallele Rissbildung im ehemaligen Austenit, die auf eine Zwillingbildung hinweist, *Abbildung 2.23d*. Glowacka et al. [161] gehen davon aus, dass die Änderungen des Gefüges entweder aus der Bildung einer Hybridphase oder hohen plastischen Dehnungen, hervorgerufen durch hohe Wasserstoffkonzentrationen, resultieren. Auch Straub et al. [166] können eine solche parallele Rissbildung in der austenitischen Phase eines Duplexstahls feststellen und führen dies auf hohe Wasserstoff- bzw. Deuteriumkonzentrationen zurück, welche hohe Dehnungen im austenitischen Gitter hervorrufen. Barnoush et al. [192] beobachten in ihren Experimenten am Duplexstahl eine ähnliche Veränderung in der austenitischen Phase. Während der Beladung des Duplexstahls können die Autoren in-situ die Bildung von Gleitlinien auf der Oberfläche der austenitischen Phase mit zunehmender Beladungszeit feststellen und führen dies auf eine durch Wasserstoff verursachte erleichterte Bildung und Bewegung Versetzungen zurück. Eine martensitische Umwandlung in der austenitischen Phase können Barnoush et al. [192] jedoch nicht feststellen. Auch andere Autoren stellen keine Martensitbildung in ihren Experimenten fest [110] bzw. wird auf eine mögliche Martensitbildung in den Untersuchungen nicht explizit eingegangen. Eine martensitische Umwandlung würde sowohl die Rissbildung als auch den Rissfortschritt begünstigen, da Martensit empfindlicher auf Wasserstoff reagiert und durch die Umwandlung dann ein an Wasserstoff übersättigter Martensit vorliegen kann.

In der ferritischen Phase kann unter Einfluss von Wasserstoff auch eine plastische Verformung vor dem Bruch stattfinden, beschreiben San Marchi et al. [19]. Sie verweisen auf Arbeiten von Lynch und beschreiben, dass die plastische Verformung im  $\delta$ -Ferrit sehr lokal erfolgt. Es werden nur sehr feine duktile Merkmale auf der Bruchfläche im  $\delta$ -Ferrit hinterlassen, die im Rasterelektronenmikroskop nur mit sehr hoher Auflösung zu erkennen sind. Allgemein beschreibt Lynch [79] unterschiedliche, durch Wasserstoff hervorgerufene fraktographische Erscheinungen in verschiedenen Stählen. Unter anderem wird gezeigt, dass unter Einfluss von Wasserstoff auch eine duktile Bruchfläche durch das Zusammenwachsen von Mikroporen möglich ist. Die Mikroporen werden aber unter Wasserstoffeinfluss kleiner im Durchmesser und sind nicht so tief wie bei wasserstofffreien Werkstoffen [79].

In einigen Arbeiten [185, 186, 193, 194] wird auch gezeigt, dass sich die Bruchtopographie zwischen Oberfläche und Kern einer Zugprobe unterscheiden kann. Oberflächennah entsteht ein makroskopisch versprödeter Bereich, der wenige  $\mu\text{m}$  in die Probe hinein reicht. Zum Kern der Probe hin wechselt die Bruchtopographie vom Spaltbruch zum duktilen Wabenbruch. Zudem wird in den Arbeiten, die dieses Verhalten beschreiben erläutert, dass auf der Probenoberfläche mehrere spröde Anrisse zu sehen sind [185, 186, 193, 194].

Generell ist ein Wechsel der Bruchtopographie von interkristallinem (IC) über transkristallinem (QC) Spaltbruch bis hin zum duktilen Bruch durch Zusammenwachsen von Mikroporen (MVC) unter Einfluss von Wasserstoff möglich, wie es zum Beispiel für supermartensitische Stähle [25, 195] oder auch niedriglegierte hochfeste Stähle [182] beobachtet wurde. Der Wechsel der Bruchtopographie ist dabei von der lokalen Wasserstoffkonzentration und der lokalen Dehnung abhängig. In *Abbildung 2.24* ist die Abhängigkeit der Bruchtopographie von der lokalen Dehnung und der lokalen Wasserstoffkonzentration sowie die Überlegung von Beachem [182] dargestellt.



*Abbildung 2.24: Wechsel der Bruchtopographie in Abhängigkeit der lokalen Wasserstoffkonzentration und der lokalen Beanspruchung in einem supermartensitischen Stahl (links) [25] und niedriglegierten hochfesten Stählen (rechts) [182]*

Die Rissinitiierung wird von den Autoren [25, 182, 195] als interkristalliner Riss dargestellt (IC oder IG). Diese Beobachtung deckt sich mit den zuvor beschriebenen Ergebnissen für eine Rissinitiierung an Korn- oder Phasengrenzen, zumeist in der ferritischen Phase des Duplexstahls (siehe *Abbildung 2.23a*, [60]). Bei hohen Wasserstoffkonzentrationen und geringen Dehnungen findet eine Werkstofftrennung entlang dieser Gefügeunregelmäßigkeit statt. Hier ist die Trennfestigkeit geringer als im Korn selbst, welche durch die schädigende Wirkung von Wasserstoff weiter herabgesetzt werden kann. Zudem können an Korn- und Phasengrenzen hohe Mengen an Wasserstoff getrappt sein, die den Prozess beschleunigen [25, 182, 195]. Ausgehend von einer elektrochemischen Wasserstoffaufnahme oder unter Druckwasserstoff ist die Wasserstoffkonzentration in oberflächennahen Bereichen am größten. Im weiteren Rissfortschritt kann der Riss in einen transkristallinen (TC) bzw. quasi Spaltbruch (QC) übergehen. Hier wirkt eine geringere Wasserstoffkonzentration als zu Beginn und die Beanspruchung, zum Beispiel die Dehnung an der Risspitze, ist höher. Mit steigender Beanspruchung und abnehmender Wasserstoffkonzentration ist der Wechsel zum duktilen Rissfortschritt durch das Zusammenwachsen von Mikroporen (DC oder MVC) möglich. Mit zunehmender Beanspruchung steigt auch die Rissgeschwindigkeit. Bedingt



durch das Wasserstofftransportverhalten diffundiert weniger Wasserstoff vor die Riss Spitze bzw. der Wasserstoff kann der Riss Spitze nicht mehr folgen. Mit zunehmender Tiefe des Risses und zunehmender Geschwindigkeit findet kein neuer Antransport von Wasserstoff mehr statt und allein der im Gefüge bereits vorhandene Wasserstoff trägt zum Versagen bei [25, 182, 195].

## 2.4 Numerische Simulation wasserstoffunterstützter Risse

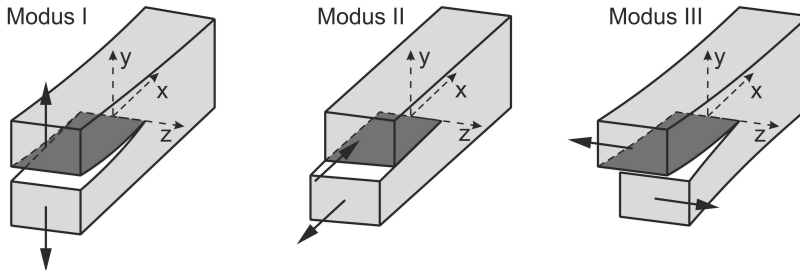
Numerische Methoden wurden früher überwiegend in der schweißtechnischen Forschung und Entwicklung eingesetzt, um z.B. Schweißprozesse zu optimieren oder Bauteilverzüge zu minimieren. Heutzutage kommt die Finite-Elemente-Methode (FEM) in vielen Bereichen der Industrie und Forschung zum Einsatz, da sich hier eine enorme Zeitersparnis für Parameterstudien ergibt und die Ergebnisse zumeist schneller ausgewertet werden können. Vorhandene Modelle lassen sich einfach auf andere Materialien und Strukturen übertragen und können so zur Ersparnis von Zeit und Aufwand bei der Aufklärung von Schadensfällen beitragen. Mit zunehmender Weiterentwicklung der Rechentechnik wurden die Modelle immer detaillierter und die Berücksichtigung komplexer mikromechanischer Vorgänge ist in heutigen FE-Analysen möglich. Dazu zählen auch eine Reihe von numerischen Modellen die es ermöglichen, Rissimulationen in komplexen Bauteilen vorzunehmen. In den Arbeiten von Mishnaevsky [196] und Mishnaevsky und Schmauder [197] wird eine Übersicht zu den möglichen numerischen Herangehensweisen zur Simulation von Rissen gegeben. In der Arbeit gehen die Autoren auf die prinzipielle Herangehensweise bei der Erstellung von Modellen zur Berücksichtigung der Mikrostruktur ein, wobei die Modelle für makroskopische Simulationen als auch auf der Mesoebene zur Berücksichtigung von Realstrukturen eingesetzt werden können. Für die Simulation von Rissen stellen die Autoren eine Reihe von Modellen vor, mit denen sich duktile oder spröde Risse in unterschiedlichen Gefügen numerisch abbilden lassen. Unter anderem wird auf das Kohäsivzonen-Modell (engl.: cohesive zone model, CZM), die Element-Elimination-Technik (engl.: element elimination technique, EET), das Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) Modell sowie weitere, auch kombinierte Modelle eingegangen. Diese Modelle ermöglichen die numerische Betrachtung von Schädigungsvorgängen in unterschiedlichen Werkstoffen unter Berücksichtigung verschiedener Randbedingungen, die auf eine Bauteilschädigung Einfluss haben.

Für die Modellierung wasserstoffunterstützter Risse (HAC) müssen verschiedene Anforderungen an das Modell erfüllt sein [12]. Dabei gilt es, die Wasserstoffverteilung möglichst numerisch zu berechnen. Hingegen kann die Ermittlung der lokalen mechanischen Beanspruchung auch analytisch erfolgen, um Rechenzeit und Speicherplatz zu sparen. Generell ist zu bemerken, dass die numerische Simulation von HAC nicht nur auf Basis der drei Einflussgrößen lokale mechanische Beanspruchung, lokale Mikrostruktur und lokale Wasserstoffkonzentration erfolgt, sondern vielmehr einen Vergleich der risskritischen mit den aktuellen Bedingungen beinhalten sollte [12]. Dafür sind während einer Modellierung wiederholte transiente Finite-Elemente-Analysen (FEA) durchzuführen.

Im Folgenden sollen nun einige grundlegende Sachverhalte in Bezug auf die Modellentwicklung zur numerischen Simulation wasserstoffunterstützter Risse dargestellt werden. Die Bruchmechanik unterscheidet hinsichtlich der Deformation eines Risses drei verschiedene

Rissöffnungsarten (Rissmodi) [198], wie es in der *Abbildung 2.25* dargestellt ist. Der Modus I kennzeichnet eine symmetrische Rissöffnung.

Der Riss liegt senkrecht zur Belastungsrichtung und eine Zugspannung führt zur Öffnung der Rissflanken in Richtung der Belastung. Beim Rissmodus II (Längsscherung) tritt eine asymmetrische Separation der Rissoberflächen auf. Der Riss liegt in der Belastungsrichtung und eine Schubspannung führt zu einer Relativverschiebung der Rissflanken in Richtung der Belastung. Modus III (Querscherrung) beschreibt einen Riss, der quer zur Belastungsrichtung liegt. Infolge einer Schubspannung erfolgt die Separation durch Relativverschiebung der Rissflanken in z-Richtung (Belastungsrichtung).



*Abbildung 2.25: Prinzipdarstellung der drei Rissöffnungsarten [198]*

Für die Simulation wasserstoffunterstützter Risse kann der Modus I angenommen werden, wenn sich die plastische Zone vor der Rissspitze (Prozesszone) im Vergleich zu allen charakteristischen makroskopischen Abmessungen des Körpers klein verhält [12, 198]. Generell ist dieser Modus eher bei spröden Werkstoffen, wie Keramiken, zu beobachten. Bei der HAC treten typische trans- und interkristalline Risse, meist reine Trennbrüche unter ebenen Dehnungszustand, seltener Mischbrüche und kaum reine Scherbrüche auf [12, 15, 19, 20]. Weiterhin ist der Bruchprozess sehr stark lokalisiert, d.h., die bruchmechanischen Vorgänge spielen sich in einer sehr kleinen Prozesszone vor der Rissspitze ab. Deshalb kann für die numerische Simulation der HAC der Modus I angenommen werden, zudem er aufgrund der Belastungsrichtung in der Praxis am häufigsten eintritt.

Unter dieser Annahme lässt sich HAC numerisch durchführen, indem die Prozesszone vor der Rissspitze als Mikrozugprobe betrachtet wird [12, 25, 199]. Bei Beschränkung auf den Rissmodus I lassen sich die Modellierungen zweidimensional mit Riss in x-Richtung und Belastung in y-Richtung (senkrecht zum Riss) ausführen. Durch Aneinanderreihung mehrerer fiktiver Zugproben entlang eines gegebenen Risspfades kann der Rissfortschritt simuliert werden. Dabei ist es erforderlich, für jede neue Zugprobe die sich mit dem Risswachstum verändernden Bedingungen neu zu berechnen und mit den entsprechenden Versagenkriterien zu vergleichen.

HAC ist ein zeitabhängiges Phänomen, welches vom Wasserstoffdiffusionsprozess und der mechanischen Beanspruchung abhängig ist [12, 199]. Deshalb müssen die drei Phasen des Rissprozesses [181] unter Einfluss von Wasserstoff berücksichtigt werden (*Abbildung 2.26*). Die Rissinkubation ist gekennzeichnet durch die Entstehung eines Mikrorisses, z.B. an der Oberfläche bis zur nächsten Korngrenze (meist eine Risslänge von  $c_{ini} = 0,1$  mm) [12]. Dieser Bereich liegt unterhalb des Spannungsintensitätsfaktors  $K_{th}$  und beschreibt die interkristalline Rissinitiierung. Die Risswachstumsgeschwindigkeit ist unterhalb dieses Wer-

tes nahezu Null, d.h., es findet kein Risswachstum statt. Dieser Schwellenwert repräsentiert die maximal mögliche Degradation der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff [12].

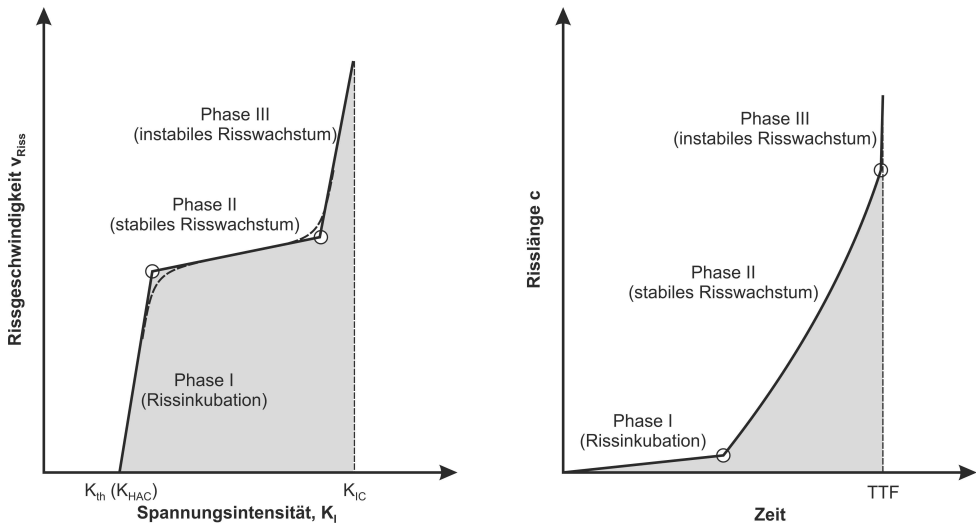


Abbildung 2.26: Schematische Darstellung der drei Risswachstumsphasen: a) Kinetik des Rissfortschritts als Funktion der Spannungsintensität [12, 25, 181]; b) Beziehung zwischen Risslänge und Zeit zur Beschreibung der Werkstoffeigenschaften unter den Bedingungen der HAC (TTF-Time to Failure: Zeit bis zum Versagen) [12, 25]

Bei Überschreiten des Wertes  $K_{\text{th}}$  kommt es zunächst zum steilen Anstieg der Rissgeschwindigkeit  $v_{\text{Riss}}$ . Dieser Anstieg markiert nach Nelson [181] den Übergang von der Rissinkubation zum kinetischen Risswachstum. Hat der Riss sich ausreichend vergrößert, stellt sich ein stabiles Risswachstum ein, gekennzeichnet durch eine nahezu konstante Rissgeschwindigkeit. Dieser Bereich entspricht dem Konzept der fiktiven Zugprobe [199]. Es werden kritische Bedingungen an der Riss Spitze erreicht und der Riss schreitet bis zur nächsten fiktiven Zugprobe fort. Die so neu entstandene Riss Spitze unterliegt erneut einer hohen Beanspruchung. Die Diffusion des Wasserstoffs an die neu gebildete Riss Spitze kontrolliert das kontinuierliche Risswachstum [181]. Durch die Diffusion von Wasserstoff an die Riss Spitze werden wieder kritische Bedingungen erreicht und der Riss wächst weiter.

Mit dem Überschreiten des Spannungsintensitätsfaktors  $K_{\text{IC}}$  steigt die Rissgeschwindigkeit enorm an und kennzeichnet den Übergang zum instabilen Risswachstum. Dieser Wert  $K_{\text{IC}}$  stellt einen charakteristischen Wert für den Werkstoff dar, da hier keine kritischen Wasserstoffkonzentrationen für den Rissfortschritt notwendig sind. Die mechanische Beanspruchung vor der Riss Spitze hat infolge des Rissfortschrittes derart zugenommen, dass der Restquerschnitt des Bauteils schlagartig und instabil versagt [12, 181].

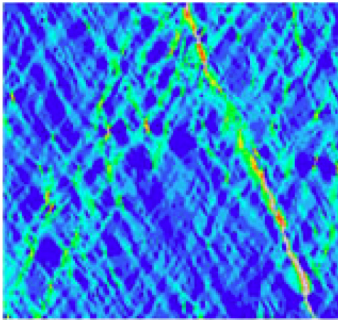
Mit dem von Böllinghaus und Hoffmeister [199] entwickelten Modell lassen sich unter Berücksichtigung der drei Einflussfaktoren, lokale Wasserstoffkonzentration, lokale Beanspruchung und lokales Gefüge, wasserstoffunterstützte Werkstoffschäden in einfacher Weise numerisch abbilden. Dabei kann die Kennwertermittlung zur Eingabe der Risskriterien über einfache ingenieurtechnische Experimente, wie Zugversuche, erfolgen. Das Modell wurde

erstmals für die Simulation eines wasserstoffunterstützten Risses im 4-Punkt-Biegversuch eingesetzt [199]. Viyanit [25] nutzte dieses Modell für die Simulation der wasserstoffunterstützten Spannungsrisskorrosion in supermartensitischen Stählen. Für die Simulation wurde eine konstante Wasserstoffkonzentration kurz unter der Oberfläche (Subsurface Concentration) des Stahls angenommen, um die elektrochemische Wasserstoffaufnahme zu simulieren. Wongpanya et al. [24] nutzte das erweiterte Modell von Viyanit für die Simulation wasserstoffunterstützter Kaltrisse in hochfesten Feinkornbaustählen während des Schweißprozesses. Zum Erreichen präziser Ergebnisse für die Wasserstoffverteilung in der Schweißverbindung wurden die Diffusionskoeffizienten für jeden Zeitschritt in Abhängigkeit vom Gefüge und Temperaturgradienten neu berechnet. Dadurch war die indirekte Kopplung der Wasserstoffdiffusion mit dem Schweißprozess möglich.

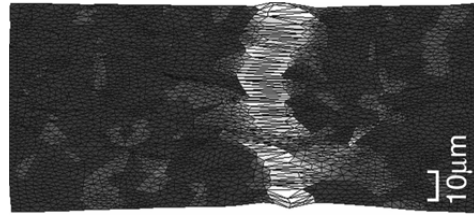
In den Arbeiten von Olden et al. [22, 54, 200] wird das Kohäsivzonen-Modell für die Simulation wasserstoffunterstützter Risse in Duplexstählen genutzt. Die Rissinitiierung und der Rissfortschritt werden simuliert, indem für die Kohäsivelemente eine wasserstoffabhängige Trennfestigkeit in Form einer Kohäsivspannung vorgegeben wird. Bei Überschreitung dieser Kohäsivspannung wird die Öffnung der Kohäsivelemente und somit der Rissfortschritt numerisch abgebildet. Auch andere Autoren nutzen häufig das Kohäsivzonenmodell zur Simulation wasserstoffunterstützter Werkstoffschäden in niedriglegierten hochfesten Stählen [23, 155, 201, 202]. Jedoch können die benötigten Kennwerte solcher Modelle, die zumeist aus mehreren Faktoren berechnet werden müssen, mit einfachen Experimenten oft nicht ermittelt werden. Außerdem erlauben sie häufig keine direkte Korrelation des Einflusses von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffes. Die Implementierung dieser Modelle bzw. die Verknüpfung der Modelle mit entsprechenden wasserstoffabhängigen Versagenskriterien ist nicht trivial und bedingt fast immer die Programmierung eigener Subroutinen im Finite-Elemente-Modell.

Allerdings wurden diese Simulationen alle auf der makroskopischen Ebene unter Annahme makroskopischer Werkstoffkennwerte durchgeführt. Das Gefüge der Duplexstähle besteht jedoch aus zwei Gefügephasen, Austenit und  $\delta$ -Ferrit, und bietet somit kein homogenes Gefüge. Zur Beurteilung von Schädigungsmechanismen in Duplexstählen sollten daher die Eigenschaften der Gefügebestandteile und die damit verbundene Anisotropie Berücksichtigung finden. Hierfür eignen sich insbesondere Modelle, welche die Betrachtung der Meso- oder Mikroebene ermöglichen. In *Kapitel 2.2* wurde bereits auf Mesomodelle zur Simulation des mechanischen Verhaltens in den Phasen von Realgefügen eingegangen.

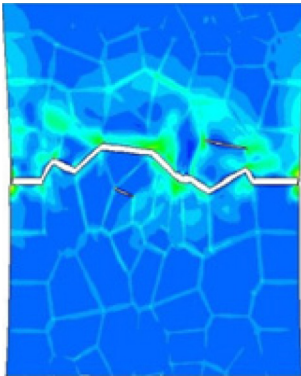
In den Arbeiten von Sun et al. [203] sowie McDowell und Dunne [204] werden Simulationen zur Vorhersage des duktilen Versagens in einem ferritisch-martensitischen Dualphasenstahl bzw. in Titanlegierungen durchgeführt. Das duktile Versagen des Werkstoffes wird dabei nicht über eine Werkstofftrennung simuliert, sondern der Ort des Versagens wird über die Akkumulation von plastischer Verformung im Gefüge vorhergesagt. Die Autoren von [203] nutzen dafür ein Modell des Realgefüges, *Abbildung 2.27a*, und untersuchen verschiedene Randbedingungen sowie unterschiedliche Orientierungen und Lagen des Mesomodells in der makroskopischen Probe. McDowell und Dunne [204] hingegen nutzen ein Modell mit mehreren Körnern des Gefüges und berücksichtigen die vorher bestimmte kristallographische Orientierung der Körner. Beide Autorentams können gute Übereinstimmungen zwischen Simulation und Experiment erreichen.



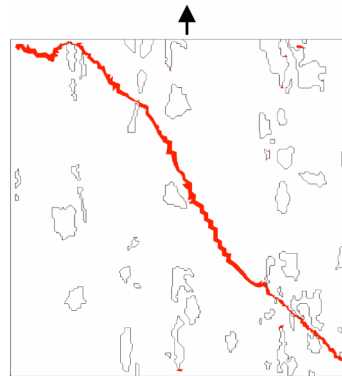
a) Vorhersage duktilen Versagens durch Akkumulation plast. Dehnung [203]



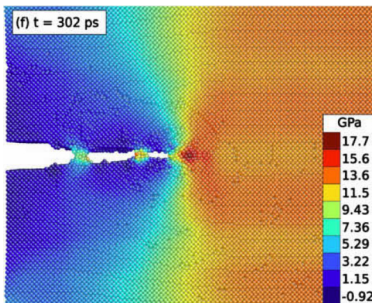
b) Duktilen Versagen im Ferrit-Perlit Realgefüge, GTN-Modell [205]



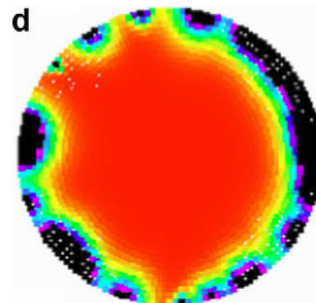
c) Duktiler interkristalliner Riss, erweitertes GTN-Modell [206]



d) Duktilen Versagen in einem Realgefüge einer Al-Legierung, EET-Modell [207]



e) Zusammenwachsen von Mikroporen auf atomarer Ebene, CZM-Modell [208]



f) Rissbildung in einer Zugprobe im SSRT, FBM-Modell [209]

Abbildung 2.27: Darstellung verschiedener Modelle zur Simulation einer Werkstoffschädigung

Ohata et al. [205] führen numerische Simulationen duktilen Risswachstums unter Nutzung eines GTN-Modells im Realgefüge eines ferritisch-perlitischen Stahls durch. Die Simulation der Risse im Modell erfolgt durch Entstehung und Zusammenwachsen von Mikroporen, *Abbildung 2.27b*. Auch die Autoren Pardoen et al. [206] nutzen ein GTN-Modell und simulieren duktile inter- und transkristalline Werkstofftrennungen in einem idealisierten Modell mit mehreren Körnern, *Abbildung 2.27c*.

In der Arbeit von Weber [207] wird die „element elimination technique“ (EET) genutzt, um duktilen Versagen in Aluminiumlegierungen mit Siliziumkarbideinschlüssen zu simulieren. Die Werkstoffschädigung wird dabei über einen zuvor berechneten Schädigungsparameter gesteuert. Kommt es zum Überschreiten dieses Wertes, wird das entsprechende Element im Modell des Realgefüges eliminiert, *Abbildung 2.27d*. In dieser Arbeit werden auch Simulationen an Realgefügen eines Duplexstahls und Modellen mit idealisierten Duplexgefügen durchgeführt. Jedoch wird die simulierte Werkstoffschädigung nur anhand des Schädigungsparameters dargestellt. Der Autor ermittelt mit den Modellen des idealisierten Duplexgefüges, dass die Werkstoffschädigung nur gering von der Verteilung der austenitischen Phase abhängt. In der Simulation mit den Realgefügen des Duplexstahls als auch der Aluminiumlegierung zeigte sich jedoch gegenüber den künstlichen Gefügen ein erhöhtes Schädigungspotential. Der Autor konstatiert, dass sich durch eine homogenere Verteilung der austenitischen Phase im Duplexgefüge die Versagensanfälligkeit des Gefüges reduzieren und somit optimieren lässt. Schwerpunkt der Arbeit von Weber et al. [207, 210] ist jedoch die Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung im niedriglegierten, feinkörnigen Ferritstahl 15 MnNi 6-3. Dafür nutzen die Autoren jedoch ein Kohäsivzonenmodell und die Simulationen werden auf atomarer Ebene durchgeführt. Auch die Autoren Choi und Kim [211] sowie Krull und Yuan [208] nutzen ein Kohäsivzonenmodell für die Simulation duktilen Versagens auf atomarer Ebene. Dabei können die Autoren Krull und Yuan die Entstehung von Mikroporen und deren Zusammenwachsen in ihrem Modell abbilden, *Abbildung 2.27e*.

Die bisher genannten numerischen Untersuchungen sind, bis auf die Arbeit von Weber et al. [210], Simulationen duktiler Werkstoffschädigung und berücksichtigen weder eine Wasserstoffdiffusion noch eine Degradation der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff. In der Arbeit von Rimoli und Ortiz [212] hingegen wird die schädigende Wirkung des Wasserstoffs berücksichtigt. Jedoch wird hier nur ein einphasiger, niedriglegierter hochfester Stahl für die Simulation verwendet. Dennoch kann in diesem idealisierten Modell die interkristalline Werkstofftrennung entlang von Körnern im Gefüge dargestellt und der Einfluss von Wasserstoff untersucht werden. Die Autoren verwenden für die Simulation der Werkstofftrennung ein Kohäsivzonenmodell.

Alle bisherigen Modelle sind zum Teil sehr komplex und bedürfen meist sehr aufwendig zu bestimmende Werkstoffkennwerte. Zudem ist die Implementierung dieser Modelle in die Finite-Elemente-Methode nicht trivial. Das Modell von Weber [207] mit der EET und Nutzung eines Versagenskriteriums entspricht am ehesten der Idee des Modells von Böllinghaus und Hoffmeister [199] zur Simulation wasserstoffunterstützter Risse. Zudem ist die Umsetzung dieser Herangehensweise in der Finiten-Elemente-Methode sehr einfach und erlaubt zudem die Nutzung einfach zu bestimmender Werkstoffkennwerte. Ferner wird in der Arbeit von Dietzel et al. [209] ein ähnliches Modell erfolgreich für die Simulation wasserstoffunterstützter Werkstoffschäden in einer Magnesiumlegierung eingesetzt. Die Autoren verwenden ein sogenanntes „Fibre Bundle Model“ (FBM) und simulieren sprödes Versagen in einem Zugstab während eines Slow Strain Rate Tests (SSRT), *Abbildung 2.27f*.

Zusammenfassend ist zu bemerken, dass die unterschiedlichen Modelle alle in der Lage sind, eine Werkstoffschädigung in unterschiedlichen Materialien abzubilden oder vorherzusagen. Dabei kann die Simulation auch unter Berücksichtigung komplexer Vorgänge im

Material, wie kristallographische Orientierung oder Gleitprozesse erfolgreich durchgeführt werden. Nach Böllinghaus [12, 199] sollte ein Modell zur Simulation wasserstoffunterstützter Werkstoffschäden und Beurteilung von Schadensfällen einfach und abgesichert sein. Zudem sollte das Modell die Berücksichtigung der drei Einflussfaktoren, lokale Wasserstoffkonzentration, lokale Beanspruchung und lokales Gefüge, erlauben. Bisher ist eine Simulation wasserstoffunterstützter Werkstoffschädigungen in einem Duplexstahl unter Nutzung eines Modells des Realgefüges nicht bekannt. Lediglich Weber [207] hat numerische Simulationen zur duktilen Werkstofftrennung mit einer sehr praktischen Herangehensweise, in einem Duplex-Realgefüge unter Nutzung eines Schädigungsparameters, durchgeführt. Das Modell von Böllinghaus und Hoffmeister [199] und die Ausführungen von Weber [207] erscheinen als sehr praktisch für eine einfache Simulation wasserstoffunterstützter Risse in Duplex-Realgefügen.

## 2.5 Zusammenfassung und Schlussfolgerung zum Kenntnisstand

Aus dem dargelegten Kenntnisstand lassen sich folgende zusammenfassende Schlussfolgerungen ableiten:

1. Austenitisch-ferritische Duplexstähle bieten bedingt durch ihre herausragenden mechanischen und Korrosionseigenschaften gegenüber den rein austenitischen und rein ferritischen korrosionsbeständigen Stählen ein hohes Potential. Dennoch kann durch unsachgemäße Verwendung der Stähle oder Unachtsamkeit eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung eintreten. Eine Wasserstoffaufnahme, zum Beispiel durch kathodischen Schutz, kann die mechanischen Eigenschaften des Werkstoffes degradieren und zum Versagen des Bauteils führen. Zur Klärung der Schadensursache und des vorliegenden Mechanismus wird eine Prüfkette über einfache Basisversuche, wie Zugprüfungen bis hin zu Bauteilversuchen, unterstützt durch numerische Simulationen, als sinnvoll erachtet.
2. Infolge des thermomechanischen Herstellungsprozesses ergibt sich eine Gefügeorientierung der austenitischen und ferritischen Phase in Walzrichtung. Diese Gefügeorientierung resultiert zusammen mit der kristallographischen Textur in den Phasen in makroskopische anisotrope mechanische Werkstoffeigenschaften. Daher ist auch davon auszugehen, dass sich auch ein anisotropes Verhalten bezüglich der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung ergibt.
3. Die unterschiedlichen Eigenschaften der Phasen bedingen ein unterschiedliches Verhalten für den Wasserstofftransport sowie eine unterschiedliche Sensibilität gegenüber Wasserstoff. Die ferritische Phase hat ein geringeres Verformungsvermögen als der Austenit und zudem ein geringeres Lösungsvermögen für Wasserstoff. Jedoch ist die Diffusion von Wasserstoff in der ferritischen Phase um bis zu fünf Zehnerpotenzen höher. Dadurch können hier schnell für eine Werkstoffschädigung ausreichend hohe Konzentrationen erreicht werden, zumal für eine Degradation der mechanischen Eigenschaften in der ferritischen Phase geringe Konzentrationen genügen. Es ist also davon auszugehen, dass eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung zuerst in der ferritischen Phase des Duplexstahls auftritt.

4. Für die numerische Abbildung des Wasserstofftransportverhaltens unter Berücksichtigung der gehemmten oder beschleunigten Diffusion existiert bereits eine Reihe von Modellen. Die Implementierung dieser Effekte ist jedoch nicht immer trivial. Zudem werden die benötigten Werkstoffdaten in der Literatur unterschiedlich quantifiziert. Eine experimentelle Bestimmung dieser Werte und die quantitative Nachweise, zum Beispiel zur Wasserstoffakkumulation vor Rissspitzen, sind zum Teil nicht oder nur mit sehr hohem Aufwand zu erreichen. Daher empfiehlt sich, die numerische Analyse der Wasserstoffverteilung unter Nutzung eines effektiven Diffusionskoeffizienten durchzuführen. Zumal einfache und abgesicherte Modelle für die Klärung von Schadensfällen heranzuziehen sind.
5. Die numerische Abbildung des Wasserstofftransportverhaltens in Abhängigkeit von der Gefügeorientierung im Duplexstahl unter Nutzung eines Modells des Realgefüges ist bisher nicht erfolgt. Zudem bleibt der Effekt einer beschleunigten oder gehemmten Diffusion entlang der Phasengrenzen und deren Auswirkung auf die Wasserstoffverteilung im Gefüge zu überprüfen.
6. Konsistent wird in der Literatur vertreten, dass aus der thermomechanischen Herstellung Druckeigenspannungen im  $\delta$ -Ferrit und Zugeigenspannungen im Austenit vorliegen. Die Höhe der Eigenspannungen wird aber unterschiedlich quantifiziert. Zudem hängen die in der Literatur verwendeten Messprinzipien zur Quantifizierung der Eigenspannungen von verschiedenen Randbedingungen ab und können durch dreiaxiale Spannungszustände und Oberflächeneffekte beeinflusst werden. Bedingt durch die Dreiaxialität dieser thermischen Spannungen lassen sich diese und deren Wirkung auf das mechanische Verhalten des Werkstoffes nur in dreidimensionalen FEM-Modellen vollwertig berücksichtigen.
7. Uneinigkeit besteht in der Literatur über die Festigkeitseigenschaften der Gefügephasen des Duplexstahls. Einmal wird der ferritischen Phase eine höhere Streckgrenze zugesprochen und ein anderes Mal hat der Austenit die höhere Festigkeit. In Zug- und Druckversuchen am Duplexstahl konnte jedoch gezeigt werden, dass die austenitische Phase, unabhängig von den vorliegenden thermischen Eigenspannungen, zuerst plastisch verformt wurde. Bei der Betrachtung rein austenitischer und rein ferritischer Stähle ist die Dehngrenze der ferritischen Stähle zumeist höher. Die Festigkeitseigenschaften der Phasen können in Abhängigkeit der Legierungselemente, Korngröße, Ausscheidungen, kristallographischen Orientierung oder Kaltverfestigung stark variieren. Für die hier erfolgten Untersuchungen wurde deshalb stets eine höhere Dehngrenze für die ferritische Phase und ein größeres Verformungsvermögen für die austenitische Phase angenommen.
8. Zur Beschreibung der mechanischen Wechselwirkung der Gefügephasen und deren Einfluss auf das makroskopische Verhalten existieren einfache mathematische Modelle. Diese Modelle erlauben jedoch nur näherungsweise pragmatische Aussagen zum mechanischen Verhalten. Eine quantitativ ausgelegte Darstellung der komplexen Wechselwirkungen der Phasen untereinander kann deshalb nur über numerische Modelle des Realgefüges erfolgen. Die resultierenden mittleren Phasenspannungen und Dehnungen ermöglichen Aussagen zum makroskopischen mechanischen Verhalten der Duplexstäh-



le und umgekehrt. Dieser Nachweis konnte bereits für Simulationen an Realgefügen mehrphasiger Stähle erbracht werden.

9. Zur Beurteilung von wasserstoffunterstützten Schadensfällen mit Hilfe der FEM sollten die Dehnungen im Gefüge korrekt abgebildet werden können, da Wasserstoff eher die Duktilitätswerte eines Werkstoffes degradiert. Daher empfiehlt es sich, auch dehnungsbezogene Kriterien für eine Schädigung durch Wasserstoff den spannungsbezogenen Werten vorzuziehen. Zudem gilt es, einfache und abgesicherte numerische Modelle für solche Analysen zu nutzen.
10. Untersuchungen zur Rissbildung in Duplexstählen haben gezeigt, dass eine Rissinitiation mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit entlang von Korngrenzen im  $\delta$ -Ferrit oder an der Phasengrenze zwischen Austenit und  $\delta$ -Ferrit eintritt und die Risse während des Rissfortschrittes häufig im Austenit arretieren. Unter Einfluss von Wasserstoff wird eine Rissbildung im  $\delta$ -Ferrit begünstigt. Fraktographisch stellen sich diese Risse als inter- oder transkristalline Spaltbrüche dar. In der austenitischen Phase tritt zumeist eine Werkstofftrennung unter plastischer Verformung auf, welche die bereits in der ferritischen Phase vorhandenen Risse miteinander verbindet. Zudem besteht die Möglichkeit, aber nicht zwangsweise, dass der Austenit unter hoher plastischer Verformung, begünstigt durch Wasserstoff, in Martensit umklappt und somit eine Rissbildung fördert.
11. Es gibt bereits eine Reihe etablierter numerischer Modelle, mit denen sich eine Rissbildung numerisch erfassen lässt. Auch mit Modellen realer Gefüge wurden auf der Mesoebene und auch auf atomarer Ebene duktile und wasserstoffunterstützte Werkstofftrennungen simuliert. Es gibt jedoch bis dato keine numerischen Untersuchungen der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen unter der Nutzung eines Modells des Realgefüges. Für die Durchführung dieser Untersuchungen sollte zunächst ein einfaches und abgesichertes numerisches Modell herangezogen werden, welches die Berücksichtigung der drei Einflussfaktoren auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung erlaubt. Hierfür scheint das Modell für die Simulation einer wasserstoffunterstützten Rissbildung von Böllinghaus und Hoffmeister [199] am geeignetsten. Zudem kann bei diesem Modell die Bestimmung risskritischer Parameter über einfache Experimente erfolgen und ermöglicht so einen schnellen Abgleich der numerischen und experimentellen Ergebnisse.

## 2.6 Aufgabenstellung

Basierend auf den Erkenntnissen ist es Ziel dieser Arbeit, ein numerisches Modell eines realen Duplexgefüges auf der Mesoebene zu generieren, mit dem die Darstellung einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung möglich ist. Besonderes Augenmerk liegt hierbei auf einem einfachen Modell zur Darstellung der lokalen Wasserstoffkonzentration, der lokalen Spannungs-Dehnungs-Verteilung und Abbildung der Werkstoffschädigung in den Phasen des Duplexstahls. Dabei ist die Möglichkeit der einfachen und abgesicherten Ermittlung der Parameter zur Eingabe in die numerische Simulation anzustreben.

Zur Durchführung der numerischen Analysen muss zunächst ein geeignetes und repräsentatives numerisches Modell des realen Duplexgefüges erstellt werden. Des Weiteren müssen entsprechende Werkstoffkennwerte, Versagenskriterien und Randbedingungen definiert werden.

Anschließend erfolgten die numerische Simulation des Wasserstofftransportverhaltens in den Phasen des Duplexstahls sowie die Analyse der Spannungs-Dehnungs-Verteilung in Abhängigkeit der makroskopischen Beanspruchung des Duplexgefüges. Anhand von Literaturdaten soll ein Abgleich numerischer und experimenteller Ergebnisse erfolgen. Aus den resultierenden Ergebnissen werden für weitere Untersuchungen risskritische Bereiche im Duplexgefüge ermittelt.

Aufbauend auf den Ergebnissen der Spannungen und Dehnungen sowie der Wasserstoffkonzentration in den Phasen des Duplexstahls erfolgt die numerische Abbildung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung. Die Simulation der Rissinitiierung und des Rissfortschritts wird dabei in Abhängigkeit unterschiedlicher Versagenskriterien und unterschiedlicher numerische Methoden zur Darstellung der Werkstofftrennung durchgeführt.

Insgesamt sollen perspektivisch Anwendungsmöglichkeiten des Modells für den Einsatz z.B. in Prüfketten zur Übertragung von Ergebnissen zwischen einzelnen Prüfverfahren, zur Klärung von Schadensursachen und -mechanismen, zur Deutung von experimentellen Ergebnissen und Lebensdauerberechnungen von geschweißten Komponenten gezeigt werden.

### 3 Prozeduren zur Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung

Nachfolgend wird die Herangehensweise bei der Simulation einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in einem realen Gefüge des Duplexstahls näher erläutert. Zunächst soll aber der hier verwendete Duplexstahl kurz charakterisiert werden. Abschließend finden die begleitenden experimentellen Arbeiten Erwähnung.

#### 3.1 Werkstoffauswahl und -eigenschaften

Für die Durchführung der numerischen Analyse wurden die Werkstoffkennwerte des Duplexstahls X2CrNiMoN22-5-3 mit der Werkstoffnummer 1.4462 herangezogen. Die chemische Zusammensetzung des Stahls ist in *Tabelle 3.1* aufgezeigt. Die Ermittlung der mechanischen Kennwerte erfolgte mit Zugproben, die quer zur Walzrichtung aus einem 6 mm Blech entnommen wurden. Die Ergebnisse der Zugprüfung sind ebenfalls in *Tabelle 3.1* aufgeführt.

*Tabelle 3.1: Chemische Zusammensetzung des Duplexstahls 1.4462 in Gew.-% und mechanische Eigenschaften*

Chemische Zusammensetzung laut Herstellerangaben in Gew.-% [213]								
	Fe	C	Cr	Ni	Mo	Mn	N	Si
<b>Min.</b>	Rest	-	21,00	4,50	2,50	-	0,100	-
<b>Max.</b>	Rest	0,030	23,00	6,50	3,50	2,00	0,200	1,00
Chemische Zusammensetzung, eigene Messung in Gew.-%								
<b>Ist</b>	Rest	0,027	21,70	5,80	2,80	1,92	0,138	0,32
Mechanische Eigenschaften laut Hersteller [214]								
<b>R<sub>p0,2</sub> in MPa</b>		<b>R<sub>m</sub> in MPa</b>		<b>A<sub>gt</sub> in %</b>		<b>A<sub>5</sub> in %</b>		
≥ 450		650 - 880		-		≥ 25		
Mechanische Eigenschaften, eigene Messung								
570		743		20		36		

Für eine Überprüfung des Gefüges auf Ausscheidungen sowie zur Bestimmung der Volumenanteile und Orientierung der ferritischen und austenitischen Gefügebestandteile wurden Proben des Duplexstahls metallographisch präpariert. Es konnten keine sichtbaren Ausscheidungen im Duplexgefüge ausgemacht werden. Das Walzgefüge des Duplexstahls ist in *Abbildung 3.1* dargestellt. Die Präparation der Proben erfolgte mit dem Farbätzmittel Beraha II. Neben der Gefügeorientierung wurde auch der Volumenanteil der Phasen ermittelt. Der vorliegende Duplexstahl hat ein Phasenverhältnis von 48 %  $\delta$ -Ferrit zu 52 % Austenit und liegt damit sehr nah am optimalen Phasenverhältnis von 50:50. Die Werte für die Phasenanteile sind Mittelwerte aus 47 Messungen in verschiedenen Bereichen des Duplexstahls.

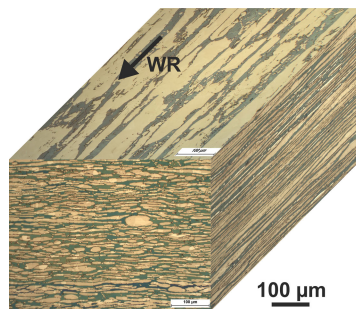


Abbildung 3.1: Orientierung der ferritischen (dunkel) und austenitischen (hell) Phase im Duplexstahl, geätzt mit Beraha II

## 3.2 Numerische Simulation

Nachfolgend werden die Modellerstellung sowie die Annahmen und Vereinfachungen für die Durchführung der numerischen Simulation dargestellt. Zunächst wird auf die Modellerstellung eingegangen. Anschließend finden die entkoppelten Teilschritte Wasserstoffdiffusion, Spannungs-Dehnungs-Analyse und Risssimulation nähere Erläuterung. Zudem werden die Randbedingungen sowie die verwendeten Kennwerte für die Teilschritte aufgezeigt.

### 3.2.1 Modelle der Realgefüge

Wie bereits im Kenntnisstand erläutert, eignet sich nur ein numerisches Modell des realen Gefüges des Duplexstahls für die numerische Analyse des Werkstoffverhaltens. Daher muss das Modell des Realgefüges auf der Mesoebene erstellt werden. Die Mesoebene ist charakterisiert durch Prozesse, die auf der Ebene zwischen dem makroskopischen Werkstoffverhalten (Zugprobe oder Bauteil) und dem Verhalten in der Mikroebene (Versetzungsstrukturen und Subkörner) ablaufen. Dafür ist die Betrachtung von Gefügebereichen mehrerer Körner bzw. der einzelnen Phasen des Duplexstahls notwendig. Die Erzeugung der numerischen Mesomodelle ist im Folgenden kurz beschrieben.

Für die Durchführung der numerischen Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung wurden mehrere unterschiedliche Modelle angefertigt. Ein Modell des realen Gefüges im Grundwerkstoff, ein Modell des realen Gefüges einer Schweißnaht und ein vereinfachtes Modell des realen Gefüges einer Schweißnaht. Mit allen Modellen wurde die Verteilung der Wasserstoffkonzentration simuliert. Zur Analyse der Spannungen und Dehnungen im Gefüge sowie für die Risssimulation wurde nur das Modell des Grundwerkstoffes herangezogen, da die beschriebenen Schadensfälle [10, 11] gezeigt haben, dass die Werkstoffschädigung im Grundwerkstoff erfolgt ist. Die Wasserstoffverteilung im Schweißgut wurde analysiert, da die Gefügemorphologie im Vergleich zum Grundwerkstoff deutlich verschieden ist und der Einfluss auf das Wasserstofftransportverhalten sowie die Wasserstoffverteilung untersucht werden sollte. Zudem ist der Schweißprozess eine mögliche Quelle für die Einbringung von Wasserstoff in das Gefüge. Dieser kann aus der Schweißnaht heraus in den Grundwerkstoff diffundieren und zur Werkstoffschädigung beitragen.

Die Generierung der Modelle sowie die Durchführung der numerischen Simulationen erfolgten mit der kommerziellen Finite-Elemente-Software ANSYS® (Version 12.1). Folgend ist die Generierung des Modells des Grundwerkstoffgefüges in ANSYS® erläutert. Die Generierung der Modelle des Schweißguts erfolgte analog zum Modell des Grundwerkstoffes.

Zunächst wurde ein Schliff quer zur Walzrichtung des Gefüges im Grundwerkstoff metallographisch präpariert und davon ein Schwarz-Weiß-Bild erstellt, *Abbildung 3.2*. Aus diesem Bild des Gefüges wurde ein repräsentativer Ausschnitt von  $100\ \mu\text{m} \times 100\ \mu\text{m}$  ausgewählt, in ein Grafikprogramm eingeladen, eine Umrissvektorisierung durchgeführt und die Vektorgrafik in ein für ANSYS® lesbares Dateiformat exportiert. Durch Verbinden der entsprechenden „key points“ mit Splines konnten die entsprechenden Flächen der ferritischen und austenitischen Phase erstellt werden. Abschließend wurde das Modell vernetzt, wobei für die Wasserstoffanalyse zwei Vernetzungen erstellt wurden. Die erste Vernetzung entspricht der Vernetzung für die Spannungs-Dehnungs Analyse und Rissimulation. Des Weiteren wurde zusätzlich eine feinere Vernetzung für die Wasserstoffanalyse genutzt, um Trapping oder Enhancing an den Phasengrenzen zu berücksichtigen. Für die Analyse der Spannungs- und Dehnungsverteilung sowie für die Rissimulation wurde die Elementzahl auf rund 50600 Elemente im Modell des Grundwerkstoffgefüges begrenzt, um den numerischen Aufwand der Berechnung so gering wie nötig zu halten und dennoch gute Ergebnisse zu erzielen. Die Berücksichtigung der komplexen dreidimensionalen Gefügemorphologie ist hier nicht erfolgt, da allein die zweidimensionalen Modelle schon mit einer Vielzahl von Elementen vernetzt werden müssen und der numerische Aufwand im dreidimensionalen Modell enorm steigen würde. Zudem haben bereits andere Autoren [36, 68, 203, 205, 207] gezeigt, dass eine zweidimensionale numerische Analyse sehr gute Ergebnisse liefert. Die verwendeten Modelle, deren Elementanzahl, deren Nutzung für entsprechende Analysen und die Volumenanteile der Phasen sind in *Tabelle 3.2* aufgeführt. Für die Simulation der Wasserstoffverteilung wurden die zweidimensionalen Modelle entsprechend mit dem Elementtyp PLANE55 und für die Analyse der Spannungs-Dehnungs-Verteilung mit dem Elementtyp PLANE182 vernetzt.

In *Abbildung 3.2* ist zu sehen, dass kleinere mikrostrukturelle Einzelheiten im Modell des Realgefüges nicht abgebildet werden. Dies ist der Vorgehensweise bei der Erstellung des Modells sowie kleinen Vereinfachungen zur Erleichterung der Vernetzung geschuldet. Dennoch ist das Modell eine sehr gute Annäherung des realen Gefüges. Zudem bietet das Gefüge keine regelmäßige Anordnung der Phasen bzw. lassen sich keine wiederholende Muster erkennen. Daher sind solche Vereinfachungen für die Modellerstellung durchaus vertretbar. Ferner konnte in den Untersuchungen von Weber [207] bereits gezeigt werden, dass auch künstlich nachgestellte Gefüge sehr gute numerische Ergebnisse liefern.

Nach dieser Vorgehensweise wurde auch das Modell des Schweißgutes erstellt, *Abbildung 3.3*. Jedoch ist hier ein Ausschnitt von  $420\ \mu\text{m} \times 420\ \mu\text{m}$  ausgewählt worden, um eine komplett vom Austenit umschlossene ferritische Phase im Modell abzubilden. Zudem wurden noch zwei vereinfachte Modelle des Schweißgutes erstellt, *Abbildung 3.3*. Einerseits sollte so ein Vergleich zwischen Realgefüge und vereinfachtes Modell ermöglicht werden. Andererseits haben diese vereinfachten Modelle ähnliche Phasenverhältnisse wie der Grundwerkstoff. Somit lässt sich der Einfluss der Gefügemorphologie auf das Diffusionsverhalten im Vergleich zum Grundwerkstoff untersuchen.

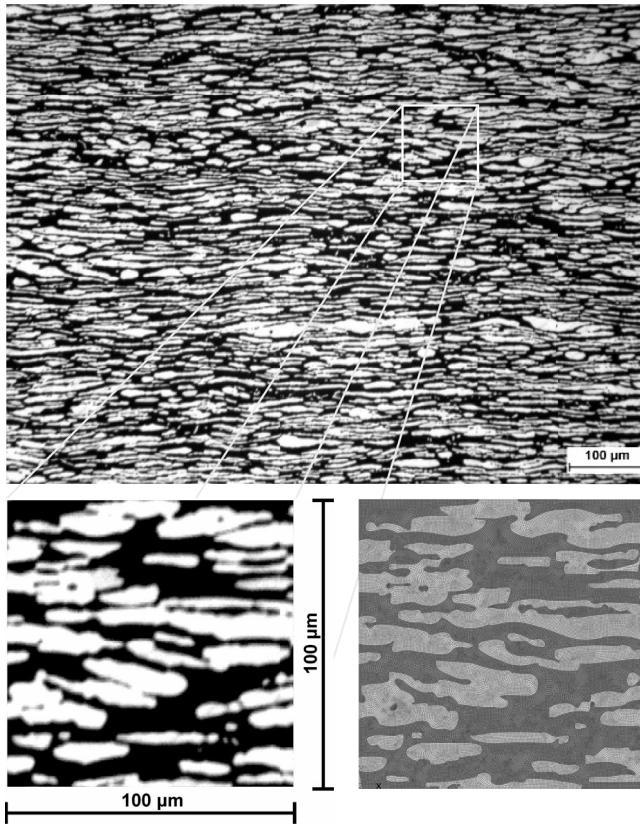
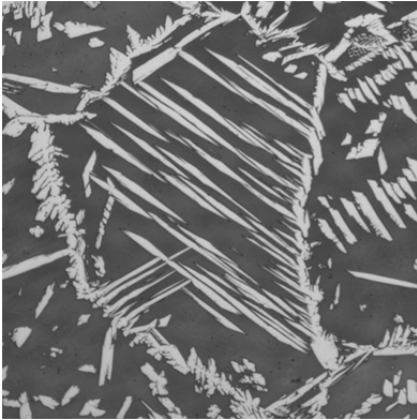


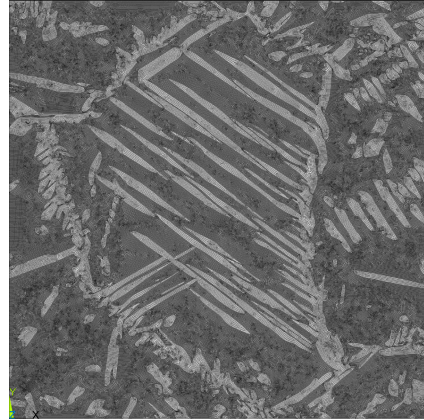
Abbildung 3.2: Schiffs des Duplexgefüge quer zur Walzrichtung (oben), ausgewählter Bereich von 100 µm x 100 µm (l. u.), Mesomodell des Duplexgefüge (r. u.), δ-Ferrit = dunkel, Austenit = hell

Der Tabelle 3.2 ist zu entnehmen, dass das Modell des Grundwerkstoffes ein Verhältnis von 46 % Austenit zu 54 % δ-Ferrit hat. Die metallographische Bestimmung der Volumenanteile ergab jedoch ein Verhältnis von austenitischer Phase zu ferritischer Phase von 52:48. Dennoch liegen die Ergebnisse der Volumenanteile innerhalb des für Duplexstähle typischen Bereichs von 40:60 bis 60:40 [4]. Zudem würde die Auswahl eines anderen Gefügebereiches für die Erstellung des Mesomodells wahrscheinlich auch ein anderes Verhältnis zeigen. Der höhere Anteil an ferritischer Phase kann in diesem Fall auch als „worst case“ angesehen werden, da die ferritische Phase eine höhere Sensibilität gegenüber Wasserstoff aufzeigt als der Austenit.

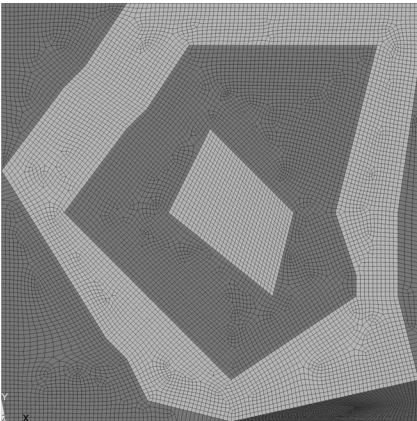
Das Phasenverhältnis des Schweißnahtgefüges liegt an der oberen Grenze des Bereichs für Schweißnahtgefüge von Duplexstählen [44, 46, 113]. Bedingt durch die hohen Volumenanteile an ferritischer Phase wäre davon auszugehen, dass die Diffusion im Schweißgut höher ist als im Grundwerkstoff. Jedoch ist der makroskopische Wasserstofftransport nicht allein vom Diffusionskoeffizienten in den entsprechenden Phasen abhängig, sondern wird zudem durch die Morphologie des Gefüges mitbestimmt [113]. Daher ergibt sich für das Schweißnahtgefüge makroskopisch ein geringerer Diffusionskoeffizient.



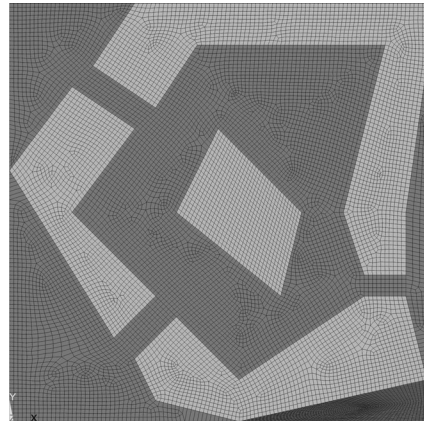
a) Querschliff des Schweißnahtgefüges



b) Modell des Schweißnahtgefüges



c) Ersatzmodell Schweißnahtgefüge, Austenit geschlossen



d) Ersatzmodell Schweißnahtgefüge, Austenit offen

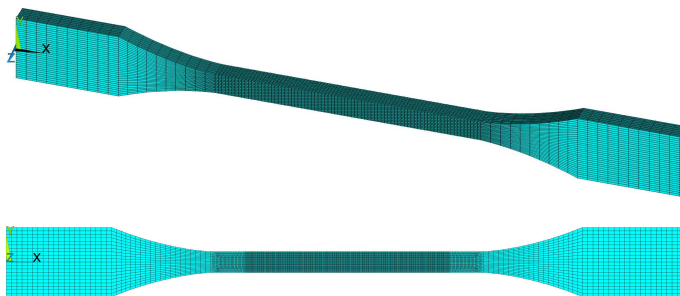
Abbildung 3.3: Querschliff vom Gefüge einer Schweißnaht des Duplexstahls, Modell des realen Schweißnahtgefüges und vereinfachte Modelle des Schweißnahtgefüges

Tabelle 3.2: Übersicht zu den numerischen Modellen sowie deren Vernetzung und Verwendung

Modell	Anzahl Elemente	Simulation			Phasenverhältnis Austenit / $\delta$ -Ferrit
		HD	$\sigma/\epsilon$	Riss	
Grundwerkstoff	50 603	X	X	X	46 / 54
Grundwerkstoff	145 406	X	-	(X, EET)	46 / 54
Schweißgut	495 489	X	-	-	30 / 70
Schweißgut, einfach offen	12 607	X	-	-	42 / 58
Schweißgut, einfach geschlossen	12 607	X	-	-	45 / 55
Einfaches Modell	10 000	X	X	-	50 / 50
3D Zugprobe	28 000	-	X	-	-
2D Zugprobe	12 000	-	X	-	-

Aus *Tabelle 3.2* ist zu erkennen, dass zusätzlich ein sehr einfaches Modell erstellt wurde. Mit diesem Modell sollen die Abhängigkeiten der Wasserstoffdiffusion sowie der Spannungen und Dehnungen in den beiden Phasen des Duplexstahls erklärt werden.

Neben den Modellen des Realgefüges des Duplexstahls wurde noch ein dreidimensionales und ein zweidimensionales Modell einer Zugprobe erstellt, *Abbildung 3.4*. Die Geometrie der Zugprobe resultiert aus den begleitenden Experimenten. Die Zugprobe ist 100 mm lang und hat einen quadratischen Querschnitt von  $9 \text{ mm}^2$  im Prüfbereich. Die Versuchslänge beträgt 40 mm und die Messlänge 35 mm. Die Modelle der Zugproben wurden erstellt, um zum einen die Werkstoffparameter der Phasen als auch des Duplexstahls zu überprüfen und die Parameter des Duplexstahls mit den Experimenten zu vergleichen. Zum anderen wurde das zweidimensionale Modell der Zugprobe genutzt, um die makroskopischen Beanspruchung der Zugprobe auf das Mesomodell zu übertragen. Dazu wurde für die Zugprobe eine Vernetzung mit einer Elementkantenlänge von 0,1 mm im Messbereich gewählt. Indem die resultierenden Verschiebungen der Knoten im Messbereich der Zugprobe auf die Randknoten des Mesomodells übertragen werden, lassen sich die aus der makroskopischen Belastung resultierenden Spannungen und Dehnungen in den Phasen des Duplexgefüges analysieren. Die Vernetzung der zweidimensionalen Zugprobe zur Ermittlung der Spannungen und Dehnungen erfolgte mit dem Elementtyp PLANE182 und für die dreidimensionale Zugprobe wurden SOLID185 Elemente verwendet.



*Abbildung 3.4: Darstellung des dreidimensionalen (oben) und zweidimensionalen (unten) Modells der Zugprobe mit sehr feiner Vernetzung im Messbereich für die Übertragung der makroskopischen Beanspruchung auf das Mesomodell des Duplexgefüges.*

#### 3.2.2 Wasserstofftransport

Die bisherigen Versionen des FE-Programmes ANSYS® boten kein eigenständiges Modul für die Simulation von Diffusionsprozessen. Neuerdings wird aber ein separates Modul für die Diffusion in der Version 14 des FE-Programmes ANSYS® bereitgestellt. Die Funktionsweise des Diffusionsmoduls ist jedoch unzureichend dokumentiert und erste eigene Untersuchungen mit diesem Programm zeigten Unzulänglichkeiten in der simulierten Wasserstoffverteilung im zweiphasigen Gefüge, was sich z.B. in negativen Wasserstoffkonzentrationen während der Simulation äußerte. Zudem bedingt die Nutzung des Moduls einen höheren Rechenaufwand, da die Gleichungsmatrizen nicht effizient gelöst werden können. Weitere Untersuchungen wären nötig, um die korrekte Abbildung der Wasserstoffkonzentration in zweiphasigen Gefügen und die richtige Handhabung des Moduls zu klären.



Aus Zeitgründen konnten diese Untersuchungen hier nicht weiter verfolgt werden und es wurde auf eine abgesicherte Herangehensweise bei der Simulation der Wasserstoffverteilung zurückgegriffen [12, 25]. Daher erfolgte die Simulation der Wasserstoffverteilung im FE-Programm ANSYS® auf Grundlage der Analogie des zweiten Fickschen Gesetzes (*Gleichung (2.14)*) und der Fourierschen Wärmeleitungsdifferentialgleichung (*Gleichung (2.15)*) mit dem Modul für die Temperaturfeldsimulation. Unter der Annahme, dass kein irreversibles Trapping auftritt, lässt sich reversibles Trapping oder auch Enhancing dadurch sehr leicht über die Nutzung des effektiven Diffusionskoeffizienten  $D_{\text{eff}}$  berücksichtigen, *Gleichung (2.16)*.

Die Simulation der Wasserstoffverteilung im Duplexgefüge wurde unter Nutzung der von Owczarek und Zakroczymski [107] bestimmten Diffusionskoeffizienten für die austenitische ( $D_{\gamma}$ ) und ferritische ( $D_{\alpha}$ ) Gefügephase eines Duplexstahls durchgeführt (*Tabelle 3.3*). Die Diffusionskoeffizienten wurden über Permeationsmessungen mit Proben unterschiedlicher Dicke, und somit unterschiedlich langen Diffusionspfaden in der ferritischen Phase bestimmt. Owczarek und Zakroczymski nutzen den von Turnbull und Hutchings [106] eingeführten Tortuositätsfaktor zur Beschreibung des verwundenen Diffusionspfades von Wasserstoff in der ferritischen Phase des Duplexstahls. Dieser verwundene Diffusionspfad führt letztendlich mit zunehmender Dicke der Permeationsproben makroskopisch zu geringeren Diffusionskoeffizienten für den Duplexstahl. Trotz der unterschiedlichen chemischen Zusammensetzung und Volumenanteile der Phasen der für die Untersuchungen verwendeten Duplexstähle, liegen die von beiden Autorentams bestimmten Diffusionskoeffizienten für beide Phasen sehr nah beieinander. Zudem stimmen die ermittelten Diffusionskoeffizienten auch sehr gut mit Diffusionskoeffizienten rein ferritischer bzw. rein austenitischer CrNi-Stähle überein, wie der Übersicht von Olden et al. [22] zu entnehmen ist.

*Tabelle 3.3: Verwendete effektive Diffusionskoeffizienten für die numerische Simulation der Wasserstoffverteilung im Duplexstahl 1.4462*

$D_{\alpha}$ in $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ [107]	$D_{\gamma}$ in $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ [107]	$D_{\text{T}}$ in $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	$D_{\text{E}}$ in $\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$
$1,5 \cdot 10^{-5}$	$1,4 \cdot 10^{-10}$	$1 \cdot 10^{-15}$	$1 \cdot 10^{-3}$

Neben den Diffusionskoeffizienten für die ferritische und austenitische Phase des Duplexstahls sind auch noch die verwendeten fiktiven Diffusionskoeffizienten für die Berücksichtigung von Trapping ( $D_{\text{T}}$ ) oder Enhancing ( $D_{\text{E}}$ ) an der austenitisch-ferritischen Phasengrenze aufgeführt. Die Diffusionskoeffizienten sind angenommene Werte, da in der Literatur keine oder nur sehr inkonsistente Werte für die Aktivierungsenergie an der austenitisch-ferritischen Phasengrenze vorliegen. Die gewählten Diffusionskoeffizienten entsprechen der Abhängigkeit des Diffusionskoeffizienten von der Aktivierungsenergie, *Gleichung (2.16)*. Im Fall von Trapping wird davon ausgegangen, dass eine höhere Aktivierungsenergie zum Verlassen der Falle notwendig ist. Daher wird hier ein geringerer Diffusionskoeffizient als in den Phasen selbst angenommen. Für eine beschleunigte Wasserstoffdiffusion wird ein verbesserter Wasserstofftransport und somit ein höherer Diffusionskoeffizient angenommen.

Die Simulation der Wasserstoffabsorption erfolgt in allen Modellen über eine Dirichletsche Randbedingung, indem die entsprechenden Knoten im Modell auf die jeweilige Ausgangskonzentration gesetzt wurden. Dabei ist die Höhe der Konzentration für den Wasserstofftransport nur von zweitrangiger Bedeutung. Die resultierende Wasserstoffkonzentration im Gefüge ist prozentual von der Ausgangskonzentration abhängig. Dies lässt sich mit Hilfe des zweiten Fickschen Gesetzes, unter Einführung der Gaußschen Fehlerfunktion an einem Diffusionspaar erklären [104], *Gleichung (3.1)*.

$$HD(x,t) = \frac{HD_0}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf} \left( \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \right] \quad (3.1)$$

Das Diffusionspaar wird repräsentiert durch zwei halbumendliche Platten, die an der Stelle  $x = 0$  verbunden sind. Es gilt  $HD = HD_0$  für  $x < 0$  und  $HD = 0$  für  $x > 0$  [104]. Werden nun zwei identische transiente FE-Analysen betrachtet, in denen der orts-, zeit- und temperaturabhängige Diffusionskoeffizient  $D(x,y,z,t,\theta)$  innerhalb eines Zeitintervalls  $t$  gleich ist, kann der Term in der Klammer für beide Berechnungen in diesem Zeitintervall als Konstante angesehen werden. Wird nun in einer der beiden FE-Berechnungen nur die Ausgangskonzentration  $HD_0$  verändert, ergibt sich an allen Stellen  $x$  im Modell zu jeder Zeit  $t$  für die Wasserstoffkonzentration  $HD(x,t)$  eine lineare Abhängigkeit von der Ausgangskonzentration.

Die Ermittlung der Abhängigkeit der Wasserstoffdiffusion von der Orientierung des Gefüges erfolgt im Modell über die Nutzung unterschiedlicher Randbedingungen. Es wurde eine Wasserstoffaufnahme längs und quer zur Gefügeorientierung sowie von allen Seiten simuliert. Dazu wurde entsprechend eine Wasserstoffkonzentration nur auf die Knoten am rechten Rand (längs, roter Pfeil), am oberen Rand (quer, blauer Pfeil) oder auf die gesamten Knoten am Rand des Modells aufgeprägt, *Abbildung 3.5*. In den ersten beiden Fällen der Diffusion, längs und quer zur Orientierung des Gefüges, wurden an den restlichen Knoten am Rand des Modells adiabatische Randbedingungen gewählt. Eine Diffusion längs der Gefügeorientierung kann durch die Diffusion von Wasserstoff aus einer Schweißnaht heraus in den Grundwerkstoff entstehen. Die Diffusion quer zur Orientierung des Gefüges ergibt sich aus einem Wasserstoffangebot an der Blech- oder Rohroberfläche, z.B. im Fall des kathodischen Schutzes einer Rohrleitung. Eine allseitige Diffusion von Wasserstoff kann aus der Kombination der beiden Fälle, nahe einer Schweißverbindung entstehen und wurde hier nur für den Vergleich mit den beiden anderen Fällen simuliert.

Im Fall der Desorption (Effusion) von Wasserstoff wurde für alle Simulationen zu Beginn der Analyse eine homogene und gleiche Wasserstoffkonzentration für beide Phasen des Duplexstahls angenommen. Zudem erfolgte hier die Effusion des Wasserstoffs aus dem Gefüge über alle Seiten des Modells. Unter Annahme einer ungehinderten Effusion des Wasserstoffs wurde dazu eine Wasserstoffkonzentration von  $HD = 0$  auf die Randknoten des Modells aufgeprägt.

Für die Analyse der Wasserstoffverteilung wurde die Akkumulation von Wasserstoff in Bereichen hoher plastischer Verformungen bzw. zusätzliche Gradienten, welche das Transportverhalten beeinflussen können, vernachlässigt und für die austenitische bzw. ferritische Phase ein konstanter Diffusionskoeffizient innerhalb der gesamten Phase angenommen. Das heißt, der Diffusionskoeffizient ist durch homogene isotrope Materialeigenschaften der Phasen selbst ortsunabhängig als auch unabhängig von der Wasserstoffkonzentration.

Zumal zunächst nur der Einfluss der Phasen selbst auf das Diffusionsverhalten untersucht werden sollte.

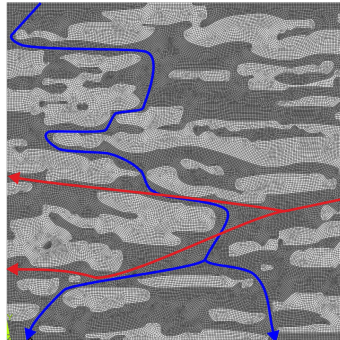


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung der Diffusionsrichtungen im  $\delta$ -Ferrit längs (roter Pfeil) und quer (blauer Pfeil) zur Orientierung des Gefüges im Grundwerkstoff

Für einen Vergleich des Wasserstofftransportverhaltens wurde für jeden Zeitschritt der Simulation die Wasserstoffkonzentration eines jeden Elements abgegriffen. Die Konzentration wurde dann mit der Fläche des jeweiligen Elements multipliziert, aufsummiert und die Summe durch die Gesamtfläche dividiert. Somit lässt sich zeitlich die Wasserstoffmenge im Modell bestimmen und mit den verschiedenen Randbedingungen untereinander vergleichen. Nachfolgend wird dieses Ergebnis als Sättigung bzw. prozentuale Sättigung des numerischen Modells bezeichnet.

### 3.2.3 Spannungs-Dehnungs-Verteilung

Für die Durchführung der numerischen Analyse der Spannungen und Dehnungen im Duplexgefüge werden mechanische Werkstoffkennwerte benötigt. Für den Duplexstahl 1.4462 sind entsprechende Kennwerte in der Literatur zu finden bzw. können über Zugversuche ermittelt werden. Für die austenitische und ferritische Phase des Duplexstahls gibt es aber keine mechanischen Kennwerte. Solche Kennwerte lassen sich zudem auch nur schwer über Zugversuche bestimmen, da es keine rein austenitischen oder ferritischen Stähle mit der gleichen chemischen Zusammensetzung gibt, wie sie im Duplexstahl vorliegen. Auch über Beugungsexperimente lassen sich nur bedingt Kennwerte bestimmen, da die beiden Phasen sich in ihrem mechanischen Verhalten gegenseitig beeinflussen. Zudem kann das Experiment selbst die Ergebnisse beeinflussen, da Oberflächeneffekte das mechanische Verhalten verändern können und zumeist nur oberflächennahe Messungen möglich sind. Aus diesen Gründen müssen für die numerische Simulation die mechanischen Kennwerte beider Phasen über typische Werte von CrNi-Stählen ähnlicher chemischer Zusammensetzung adaptiert werden. Es wird in dieser Arbeit davon ausgegangen, dass die ferritische Phase im Duplexstahl eine höhere Dehngrenze besitzt als die austenitische Phase. Zug-Druckversuche [58, 59] haben gezeigt, dass die austenitische Phase in beiden Fällen zuerst plastiziert und im Vergleich die ferritischen korrosionsbeständigen Stähle zumeist eine höhere Festigkeit besitzen [4]. Zudem weisen Härtemessungen auf eine höhere Festigkeit in der ferritischen Phase hin [58]. Für die mechanischen Kennwerte der austenitischen Phase wurden die Kennwerte des austenitischen korrosionsbeständigen Stahls

X2CrNiMo 17-12-2 (Wst.-Nummer: 1.4404, AISI 316L) herangezogen. Dieser austenitische Stahl hat die Hauptlegierungselemente Chrom, Nickel und Molybdän sowie geringe Mengen an Stickstoff. Unter Verwendung der Mischungsregel von Tamura et al. [50], der bekannten Festigkeit des austenitischen Stahls sowie der des Duplexstahls und unter der Annahme einer höheren Festigkeit des  $\delta$ -Ferrits, ergibt sich für die ferritische Phase eine höhere Dehngrenze als im Duplexstahl. Rein ferritische korrosionsbeständige Stähle haben zwar höhere Festigkeiten als austenitische CrNi-Stähle [4], jedoch gibt es keinen rein ferritischen korrosionsbeständigen Stahl mit annähernd hoher bzw. höherer Dehngrenze als im Duplexstahl. Bei der sich aus der Mischungsregel ergebenden Festigkeit für die ferritische Phase fällt jedoch auf, dass diese im Bereich von weichmartensitischen CrNi-Stählen mit ähnlicher chemischer Zusammensetzung liegt. Daher wurde hier auf die mechanischen Kennwerte des weichmartensitischen korrosionsbeständigen Stahls X3CrNiMo 13-4 (Wst.-Nummer: 1.4313, ASTM-A 182-F6NM430F) zur Generierung der Kennwerte zurückgegriffen. Dieser Stahl hat neben Chrom und Nickel auch Legierungsbestandteile an Molybdän und geringe Mengen an Stickstoff. Beide Stähle haben ähnlich geringe Gehalte an Kohlenstoff wie der Duplexstahl. Wegen der doch sehr kontroversen Diskussion des mechanischen Verhaltens der Phasen des Duplexstahls in der Literatur wurde entschieden, noch einen zweiten Fall des mechanischen Verhaltens der Phasen zu betrachten. In diesem Fall wurden die mechanischen Kennwerte der Phasen so angepasst, dass sich die Kurven der austenitischen und ferritischen Phase überscheiden, um so die starke Verfestigung des Austenits abzubilden. Die Eckdaten des mechanischen Verhaltens beider Fälle sind in der *Tabelle 3.4* aufgelistet.

*Tabelle 3.4: Verwendete mechanische Kennwerte des Duplexstahls und der Phasen des Duplexstahls für die beiden simulierten Fälle*

	Fall 1			Fall 2	
	Austenit	$\delta$ -Ferrit	Duplex	Austenit	$\delta$ -Ferrit
Phasenanteile in Vol.-%	52	48	-	52	48
Dehngrenze $R_{p0,2}$ in MPa	430	715	<b>570</b>	520	625
Zugfestigkeit $R_m$ in MPa	680	815	<b>745</b>	820	690
Gleichmaßdehnung $A_{gt}$ in %	30	11	<b>20</b>	30	11
Bruchdehnung $A_B$ in %	45	20	<b>36</b>	45	20
Dichte in $\text{kg/dm}^3$	8	7,7	<b>7,8</b>	8	7,7
Poisson	0,310	0,288	<b>0,3</b>	0,310	0,288
E-Modul in MPa	195000	206000	<b>200000</b>	195000	206000
Exponent n	11	30	<b>17,13</b>	11	40

Die Daten des Duplexstahls wurden über Zugversuche ermittelt. Die entsprechenden Werte der Phasen sind in Anlehnung an die Mischungsregel von Tamura et al. [50] generiert worden. Mit der Annahme, dass die Fließkurven der Phasen die gemittelten Werte für das aktuell im Gefüge vorliegende Spannungs-Dehnungs-Verhältnis darstellen, lässt sich das Verhältnis der Dehngrenzen als auch der Zugfestigkeiten beider Phasen über die Volumenanteile der Phasen und die gemessenen Werte des Duplexstahls entsprechend anpassen. Da die in der *Tabelle 3.4* aufgezeigten Daten für die Simulation nicht ausreichen,

wurden mit der Ramberg-Osgood Beziehung [215] (*Gleichung (3.2)*), entsprechende Fließkurven aus diesen Daten generiert. Die Ramberg-Osgood Beziehung wurde in der Form verwendet wie sie auch in der Arbeit von Rasmussen [216] zu finden ist, da diese Gleichung die beste Übereinstimmung mit der gemessenen Fließkurve ergab. In *Gleichung (3.2)* ist  $\varepsilon$ : Dehnung,  $E$ : Elastizitätsmodul,  $\sigma$ : Spannung,  $\sigma_{0,2}$ : 0,2 % Dehngrenze und  $n$ : Verfestigungsexponent. Die Exponenten für die Ramberg-Osgood Beziehung sind ebenfalls in der *Tabelle 3.4* aufgeführt. Der krumme Wert des Exponenten für den Duplexstahl resultiert aus der Anpassung der Kurve für den Duplexstahl an die experimentell ermittelten Spannungs-Dehnungs-Kurven. Die Werte des Exponenten für die austenitische und ferritische Phase sind den Werten in [36] angelehnt. Die so gefitteten technischen Fließkurven (Index:  $t$ ) des Duplexstahls sowie der beiden Phasen wurden nach *Gleichung (3.3)* und *Gleichung (3.4)* in wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven (Index:  $w$ ) umgerechnet, da ANSYS® diese als Grundlage für die Berechnung benötigt. Die entsprechenden wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der beiden Fälle sind in *Abbildung 3.6* und *Abbildung 3.7* dargestellt.

$$\varepsilon = \frac{\sigma}{E} + 0,002 \left( \frac{\sigma}{\sigma_{0,2}} \right)^n \quad (3.2)$$

$$\varepsilon_w = \ln(1 + \varepsilon_t) \quad (3.3)$$

$$\sigma_w = \sigma_t(1 + \varepsilon_t) \quad (3.4)$$

Für eine bessere Übersicht sind die wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven auf die jeweilige Zugfestigkeit begrenzt dargestellt. Für die Simulationen wurden Werte bis zur wahren Bruchdehnung verwendet. Im Fall der dreidimensionalen Simulationen wurde nach der wahren Zugfestigkeit die wahre Spannungs-Dehnungs-Kurve mit einem Mix aus linearem und exponentiellem Anstieg, wie es in [217] beschrieben ist, genutzt, um die Einschnürung besser abbilden zu können. Für die zweidimensionalen Simulationen ist die numerische Abbildung einer Einschnürung nicht ohne weiteres möglich, da mit dem Beginn der Einschnürung ein dreiachsiger Spannungs- als auch Dehnungszustand vorliegt. Hier wurde die Kurve wie in der Finiten-Elemente-Methode üblich, mit einem exponentiellen Gesetz bis zur wahren Bruchdehnung verlängert, auch um Konvergenzprobleme zu vermeiden. In diesem Fall wurde für die Verlängerung der Kurve bis zur wahren Bruchdehnung auch die Ramberg-Osgood Beziehung gewählt. Wird im Fall der dreidimensionalen Simulation die gleiche Kurve wie für das zweidimensionale Modell genutzt, so tritt keine Einschnürung im Modell auf.

Zu sehen ist, dass es für den zweiten angenommenen Fall zur Überschneidung der Fließkurven kommt. Diese Überschneidung resultiert aus der stärkeren Verfestigung der austenitischen Phase im Vergleich zur ferritischen Phase, bei dennoch geringerer Dehngrenze als im Duplexstahl. Aus der Annahme der Gültigkeit der Mischungsregel nach Tamura et al. [50] ergibt sich daher für die austenitische Phase eine höhere Zugfestigkeit als im  $\delta$ -Ferrit. Im ersten angenommenen Fall resultiert eine höhere Zugfestigkeit für die ferritische Phase. Ähnliche verlaufende Fließkurven beider Fälle sind auch in der Literatur zu finden [36, 60, 67, 71, 218].

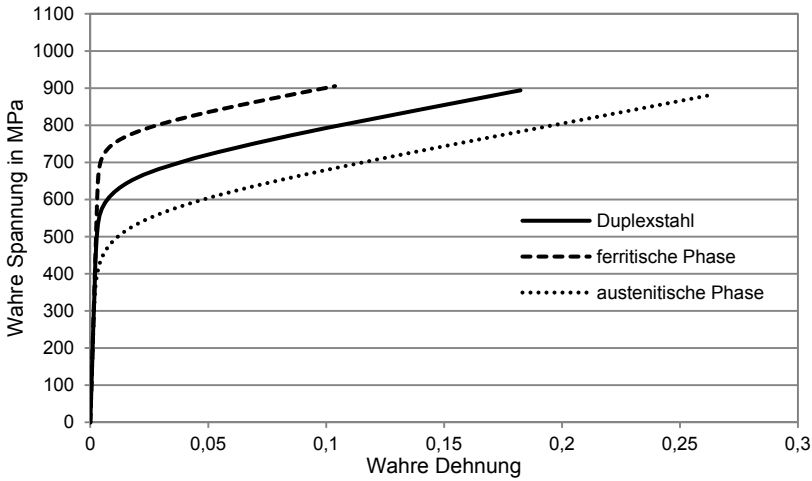


Abbildung 3.6: Wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven des Duplexstahls sowie der austenitischen und ferritischen Phase für Fall 1

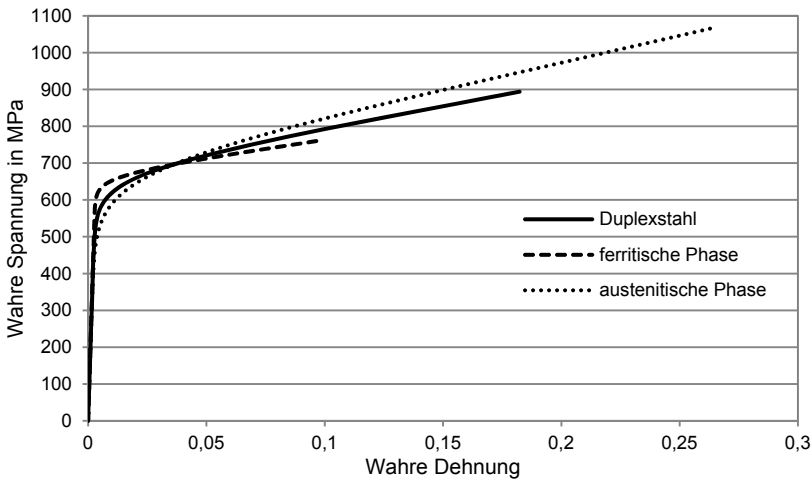


Abbildung 3.7: Wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven des Duplexstahls sowie der austenitischen und ferritischen Phase für Fall 2

Zur Überprüfung der mechanischen Kennwerte und Modelle wurden zunächst mit den Modellen der Zugprobe sowie mit dem Modell des Realgefüges des Grundwerkstoffes Zugversuche simuliert. Dazu wurden die Knoten am linken Rand des Zugprobenkopfes in alle freien Raumrichtungen fixiert. Auf der rechten Seite der Zugprobe wurde eine Verschiebung in positiver x-Richtung (Abbildung 3.4) auf die Knoten aufgeprägt. Zudem wurden die Knoten so fixiert, dass in der Zugprobe keine Biegung auftritt. Mit dem Modell des Realgefüges wurden zwei Zugversuche simuliert; zum einen längs zur Gefügeorientierung und zum anderen quer zur Orientierung des Gefüges, *Abbildung 3.8*.

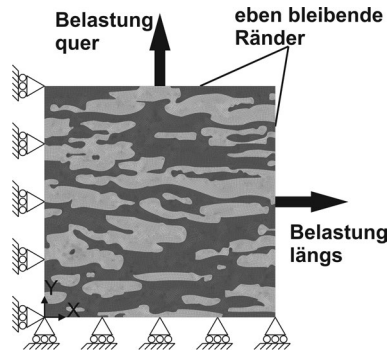


Abbildung 3.8: Schematische Darstellung der Randbedingungen für den Zugversuch am Modell des Realgefüges des Grundwerkstoffes, in Anlehnung an [207]

In Anlehnung an die Arbeit von Weber [207] wurden am linken und unteren Rand Symmetriebedingungen angenommen. Der rechte und obere Rand wurde eben gehalten, d.h., alle Knoten des entsprechenden Randes haben die gleiche Verschiebung. Für den Zugversuch längs der Gefügeorientierung wurde am rechten Rand und für den Zugversuch quer zur Orientierung des Gefüges am oberen Rand eine Verschiebung aufgeprägt. Diese Simulation erfolgte für einen Vergleich der resultierenden technischen Fließkurve des Mesomodells mit denen der Zugproben und zur Ermittlung des Einflusses der Gefügeorientierung. Zudem wurden diese Randbedingungen auch für den Vergleich der Spannungs-Dehnungsverteilung im Gefüge der beiden unterschiedlichen Fälle der phasenspezifischen Fließkurven genutzt. Alle Simulationen zur Ermittlung der Spannungen und Dehnungen sowie die der Rissimulation wurden verschiebungsgesteuert durchgeführt, um Konvergenzprobleme zu vermeiden.

Die Ermittlung der Spannungs-Dehnungs-Verteilung in den Phasen des Duplexgefüges, als Reaktion auf eine makroskopische Belastung des Werkstoffes, erfolgte durch die Übertragung der Verschiebungen eines Elements im Messbereich der zweidimensionalen Zugprobe auf das Modell des Realgefüges. Durch die feine Vernetzung der zweidimensionalen Zugprobe konnten die Verschiebungen der vier Knoten eines Elements der Zugprobe auf die vier Eckpunkte des Modells des Realgefüges übertragen werden, *Abbildung 3.9*. Die Verschiebung der Knoten am Rand, zwischen den Eckknoten des Modells, wurde über lineare Interpolation der Verschiebungen der Eckknoten und der jeweiligen Knotenposition ermittelt.

Die Durchführung der numerischen Simulation der Spannungs-Dehnungs-Verteilung erfolgte in allen Fällen unter der Annahme der kinematischen Verfestigung für das Materialverhalten. Dieses Werkstoffverhalten konnte von El Bartali et al. [73] in Zug-Druckversuchen für einen Duplexstahl festgestellt werden und kam auch in den numerischen Simulationen am Duplexstahl von Johansson et al. [36] zur Anwendung. Da die Dicke der Zugprobe von 3 mm im Verhältnis zur Länge der Zugprobe von 100 mm sehr klein ist, kann in diesem Fall ein ebener Spannungszustand für die Berechnung der Spannungen und Dehnungen angenommen werden. Die Gültigkeit dieser Annahme konnte über den Vergleich der technischen Fließkurve des Modells der zweidimensionalen Probe mit denen des dreidimensionalen Modells und den experimentell ermittelten Kurven bestätigt werden.

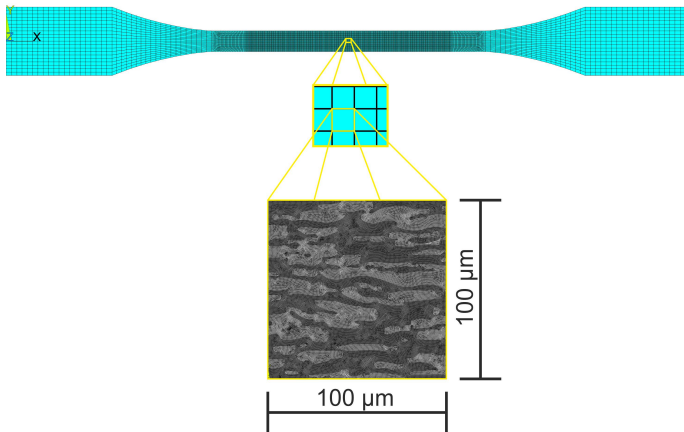


Abbildung 3.9: Schematische Darstellung der Übertragung der makroskopischen Verschiebungen aus der Zugprobe auf das Modell des Realgefüges

Im Fall des Modells des Realgefüges ist aus der Literatur zu erkennen, dass in den Berechnungen meist unterschiedliche Annahmen getroffen werden. Während die Autoren in [68, 204, 206] für die numerischen Simulationen einen ebenen Dehnungszustand (EDZ) annehmen, kommt in den Arbeiten der Autoren von [36, 203] der ebene Spannungszustand (ESZ) zur Anwendung. In den Arbeiten von Sun et al. [203] sowie Johansson et al. [36] werden jedoch die berechneten makroskopischen Kurven mit den experimentell ermittelten Kurven verglichen und es kann für die Annahme des ESZ eine gute Übereinstimmung der Kurven bestätigt werden. Sun et al. begründen ihre Annahme mit der geringen Dicke der Probe von 2 mm. In den Arbeiten der Autoren von [68, 204, 206] findet jedoch kein direkter Vergleich des simulierten makroskopischen Verhaltens mit experimentellen Ergebnissen statt. Hier werden die Ergebnisse auf der Mikroebene verglichen, jedoch können diese in Abhängigkeit des Gefüges oder der Position im Gefüge stark variieren. Romanova et al. [219] zeigen in ihrer Arbeit, dass weder Spannungen noch Dehnungen in einer der drei Raumrichtungen zu Null werden. Sie begründen dies mit der komplexen dreidimensionalen Gefügestruktur, in der in alle Raumrichtungen Spannungen und Dehnungen übertragen werden. Weber führt in seiner Arbeit [207] einen Vergleich verschiedener Randbedingungen mit der experimentell ermittelten makroskopischen Kurve durch. Dabei zeigte sich, dass sich weder mit dem ESZ noch mit dem EDZ das makroskopische Verhalten exakt abbilden lässt. Jedoch liegen die Ergebnisse unter Verwendung des ESZ weitaus näher am realen makroskopischen Verhalten als mit der Annahme des EDZ, mit der das makroskopische Verhalten stark überschätzt wird. Aus diesen Gründen wird auch für die hier durchgeführten Simulationen der Spannungen und Dehnungen in allen Modellen des Realgefüges der ebene Spannungszustand angenommen. Zudem kann für die Simulationen unter Annahme des ESZ auch in dieser Arbeit eine bessere Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven festgestellt werden, wie im Folgenden noch gezeigt wird.

Für alle hier durchgeführten numerischen Simulationen wurden die thermisch bedingten Mikroeigenstress vernachlässigt. Diese Annahme ist nach Weber [207] hinreichend genau, da der Autor keinen maßgeblichen Einfluss auf die Schädigung in seinen Simulatio-



nen feststellen konnte. Zumal die Höhe der thermischen Dehnungen in der Literatur unterschiedlich quantifiziert wird. Auch in der Arbeit von Johansson et al. [36] werden die thermischen Eigenspannungen für das zweidimensionale Modell vernachlässigt. Die Autoren begründen ihre Annahme mit der hohen Dreidimensionalität der thermischen Dehnungen, die im zweidimensionalen Raum nicht erfasst werden können. Dennoch erzielten die Autoren mit ihren numerischen Modellen sehr gute Ergebnisse im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen.

Die Auswertung der phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen erfolgte in allen Modellen des Realgefüges für jeden Zeitschritt über die Abfrage der entsprechenden Elementwerte in den Phasen des Duplexstahls. Die abgegriffenen Werte wurden dann mit der Fläche des entsprechenden Elements multipliziert und aufsummiert, um den Mittelwert der Spannungen oder Dehnungen über alle Elemente einer Phase zu erhalten. Somit sind die Ermittlung der zeitlichen und gemittelten Phasenspannungen oder -dehnungen sowie der Vergleich zwischen den zwei unterschiedlichen Annahmen für die Fließkurven der Phasen möglich. Für die Auswertung der Rissimulationen wurde zusätzlich zu den gesamten Spannungen und Dehnungen der Phasen auch die unmittelbar im Bereich der Risse auftretenden Spannungs-Dehnungswerte ermittelt. Dazu wurden entsprechend nur die Elemente in einem kleinen Bereich um den Risspfad phasenspezifisch ausgewertet.

### 3.2.4 Werkstoffschädigung

Die numerische Abbildung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung erfolgte in dieser Arbeit unter Nutzung der „node-release“ Technik in Anlehnung an Anderson [220]. Bei dieser Technik werden entlang eines vordefinierten Risspfades koinzidente Knoten erzeugt und die entsprechenden Elemente der zu trennenden Hälften des numerischen Modells jeweils mit einem dieser Knoten verbunden, *Abbildung 3.10*. Zwischen den koinzidenten Knoten wird eine Randbedingung definiert die bedingt, dass beide Knoten die gleiche Verschiebung im Raum haben. Diese Randbedingung wird entfernt sobald es zur Überschreitung eines für Rissinitiation oder -fortschritt definierten Kriteriums kommt und beide Knoten können sich dann wieder unabhängig voneinander bewegen. Zur Vermeidung von Konvergenzproblemen ist es ratsam, zwischen diesen Knoten ein Feder-Dämpfer-System zu verwenden. Hierfür wurde das Feder-Dämpfer-Element COMBINE40 genutzt. Die „node-release“ Technik ermöglicht zudem auch die Berücksichtigung der drei Einflussfaktoren auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung, wie sie auch im Modell von Böllinghaus und Hoffmeister [199] einbezogen werden.

Zudem wurde für die numerische Simulation des Rissfortschrittes die Lage der aktuellen Risspitze im Modell des Realgefüges über den Winkel  $\alpha$  berücksichtigt. Für jeden Zeitschritt erfolgte die Abfrage des Winkels sowie der nominellen Dehnungen in x und y Richtung, um die aktuelle Beanspruchung senkrecht als auch parallel zur Risspitze zu ermitteln. Dadurch ist es möglich die Simulation der Werkstofftrennung mit Rücksicht auf Bruchmodus I und/oder II durchzuführen. Für die numerische Abbildung der Werkstofftrennung wurden nur die nominellen Dehnungen berücksichtigt und es kam keine klassische Bruchmechanik zur Anwendung.

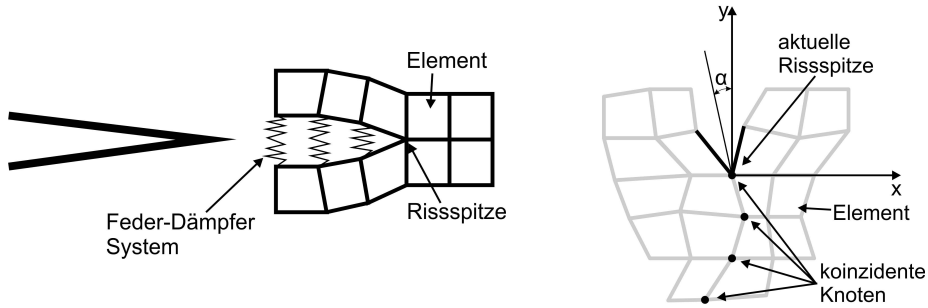


Abbildung 3.10: Schematische Darstellung der „node-release“ Technik und Berechnung des aktuellen Risspitzenwinkels für die numerische Abbildung der Werkstoffschädigung

Neben der „node-release“ Technik wurde für einen Vergleich und zur Ermittlung risskritischer Bereiche im Duplexgefüge die Element-Elimination-Technique (EET) genutzt, welche unabhängig von einem vorgegebenen Risspfad operiert und sich in ANSYS® über die „Birth and Death“ Technik realisieren lässt. Auch diese Methode der Rissimulation erlaubt die Berücksichtigung der drei Einflussfaktoren auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung. Jedoch muss in diesem Fall eine sehr feine Vernetzung erreicht werden, um Konvergenzprobleme zu reduzieren und die Rissbildung darstellen zu können. Eine sehr feine Vernetzung bedingt jedoch sehr hohe Rechenzeiten und einen enormen Speicherbedarf für die Ergebnisdateien, da für jeden Zeitschritt eine Speicherung des aktuellen Modells zur Darstellung des Rissfortschrittes erfolgen muss. Zudem entstehen durch das Deaktivieren von Elementen Konvergenzprobleme, welche schwieriger zu beherrschen sind, da sich entsprechende Elemente zur Abfederung der Werkstofftrennung nur bedingt implementieren lassen. Aus zeitlichen Gründen und begrenzten Speichermöglichkeiten wurde diese Methode nur für einen Vergleich und zur Ermittlung risskritischer Bereiche genutzt. Daher ist auch nur ein kurzes Zeitintervall für sprödes Versagen in der ferritischen Phase simuliert worden.

Das für die Rissinitiierung und den Rissfortschritt benötigte Kriterium wird repräsentiert durch eine kritische Kombination aus der lokalen Wasserstoffkonzentration und der lokalen Beanspruchung, in diesem Fall die lokale Dehnung. Die Verwendung eines solchen Kriteriums ermöglicht die Ermittlung der schädigenden Wirkung von Wasserstoff auf einen Werkstoff über einfach zu realisierende Zugversuche. Dazu werden wasserstoffbeladene Zugproben bis zum Bruch gezogen und die wahre Bruchdehnung bestimmt, wie es zum Beispiel für hochfeste Feinkornbaustähle [221] oder einen supermartensitischen Stahl [25, 222] bereits erfolgt ist. Über die Darstellung der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration lässt sich die eigenschaftsdegradierende Wirkung des Wasserstoffs beschreiben. Die Berechnung der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  erfolgt über Gleichung (3.5):

$$\epsilon_w = \ln \left( \frac{A_0}{A_b} \right), \quad (3.5)$$

mit  $A_0$ : Ausgangsquerschnitt der Zugprobe und  $A_b$ : Bruchquerschnitt.

Mit zunehmender Wasserstoffkonzentration nimmt die Duktilität des Werkstoffes ab und die Bruchdehnung wird kleiner. Bei ausreichend hohen Wasserstoffkonzentrationen kann die Duktilität sogar soweit herabgesetzt werden, dass es zum Zusammenfall der Zugfestigkeit mit der 0,2 % Dehngrenze kommt und der Werkstoff bei Erreichen von  $R_{p0,2}$  oder auch schon früher versagt [221].

Im Fall des hier verwendeten Duplexstahls X2CrNiMoN 22-5-3 wurde jedoch auf bereits in der Literatur verfügbare Werte zurückgegriffen. Für die austenitische und die ferritische Phase des Duplexstahls stehen jedoch keine solchen Kennwerte zur Verfügung, da es keine rein ferritischen bzw. rein austenitischen Stähle mit gleicher chemischer Zusammensetzung gibt. Hier wurden Kennwerte von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen genutzt. Für die ferritische Phase des Duplexstahls musste auf die in der Arbeit von Böllinghaus et al. [222] dargestellten Kriterien für einen supermartensitischen Stahl zurückgegriffen werden, da es nur sehr wenige bis keine Literaturwerte der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für rein ferritische CrNi-Stähle gibt. Für diese Stähle ist jedoch bekannt, dass sie sehr sensibel gegenüber einer Degradation ihrer mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff reagieren, wie es auch der *Abbildung 3.11* für den Supermartensit und die Feinkornbaustähle zu sehen ist. Zudem wurde in *Kapitel 2.3.3* bereits gezeigt, dass die Rissinitiierung in der ferritischen Phase des Duplexstahls am wahrscheinlichsten ist und die Risse häufig von der austenitischen Phase gestoppt werden.

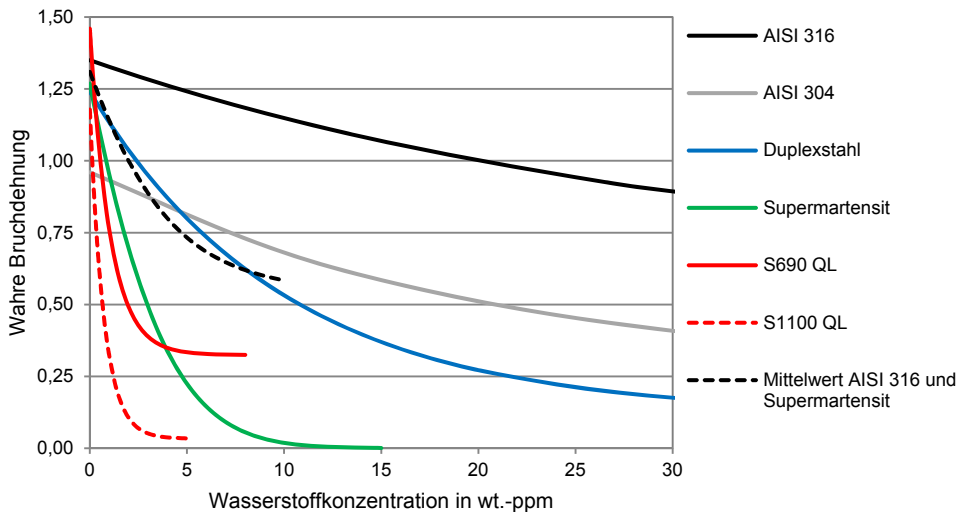


Abbildung 3.11: Verschiedene wasserstoffabhängige Bruchkriterien für Duplexstähle, austenitische CrNi-Stähle, supermartensitische Stähle und hochfeste Feinkornbaustähle (Literatur siehe Text)

Die entsprechenden Bruchkriterien des Duplexstahls [19, 187, 188, 223], der austenitischen Stähle AISI 316 [224–227] und AISI 304 [145, 224, 228] sowie für den supermartensitischen Stahl [25, 222] sind in *Abbildung 3.11*, zusammen mit den Bruchkriterien der hochfesten Feinkornbaustähle S690 QL und S1100 QL [221], dargestellt. Die gesamten Werte für die Stähle sowie die Gleichungen der Kurven sind im Anhang aufgeführt. Für einen Vergleich mit den Bruchkriterien des Duplexstahls wurde aus den Kurven der austeniti-

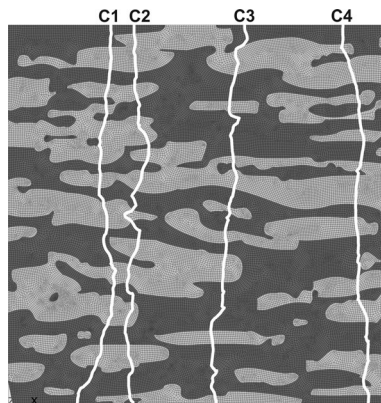
schen Stähle der Serie AISI 316 und dem supermartensitischen Stahl der Mittelwert gebildet. Sehr gut zu sehen ist die zufällig gute Übereinstimmung der Mittelwertkurve (schwarz, gestrichelt) mit der Kurve des Duplexstahls (blau), bis zu einer Wasserstoffkonzentration von  $HD = 10$  wt.-ppm. Der austenitische Stahl erreicht bei dieser Wasserstoffkonzentration noch immer sehr hohe Duktilitätswerte und würde im Zugversuch noch eine deutliche Einschnürung zeigen. Hingegen besitzt der supermartensitische Stahl nahezu keine Duktilität mehr und ein Versagen des Werkstoffes wird sehr wahrscheinlich kurz nach Erreichen der 0,2 % Dehngrenze eintreten. Eine Einschnürung wäre in diesem Fall im Zugversuch nicht erkennbar und die Zugfestigkeit würde wahrscheinlich auch nicht erreicht werden. Aufgrund der sehr guten Übereinstimmung der Mittelwertkurve mit der des Duplexstahls wird für die austenitische und die ferritische Phase des Duplexstahls ein ähnliches Verhalten wie für den austenitischen Stahl AISI 316 bzw. den supermartensitischen Stahl angenommen. Deshalb wird für eine Wasserstoffkonzentration von  $HD \geq 10$  wt.-ppm von einer vollständigen Versprödung der ferritischen Phase des Duplexstahls ausgegangen. Hingegen fallen im Austenit die Werte der Duktilität nicht merklich ab.

Die Werte der wahren Bruchdehnung wurden für die hier durchgeführte numerische Abbildung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung als Anhaltspunkt genutzt, um die Degradation der mechanischen Eigenschaften der Phasen des Duplexstahls einschätzen zu können. Für die Simulation einer duktilen Werkstofftrennung wurde das Kriterium auf die wahre Dehnung bei Zugfestigkeit begrenzt, da sich für die Rissimulation unter Nutzung der hohen wahren Dehnungen, wie sie in *Abbildung 3.11* dargestellt sind, starke Konvergenzprobleme einstellten. Daher wird das Erreichen der Dehnung bei Zugfestigkeit in diesen Simulationen als Kriterium für duktiles Versagen der Phasen genutzt. Dabei wird die starke plastische Verformung während der Einschnürung vernachlässigt. Die Annahme ist jedoch hinreichend, da im Ingenieursbereich kein Bauteil oberhalb der 0,2 % Dehngrenze ausgelegt wird. Kommt es während der Montage oder im Betrieb dennoch zu einer plastischen Verformung, wird diese sehr wahrscheinlich nicht höher als die plastische Verformung bei der Zugfestigkeit liegen. Überschreitet die Beanspruchung dennoch die Zugfestigkeit, so wird eine Einschnürung bzw. deutliche Verformung sichtbar und das Bauteil muss getauscht werden oder das Bauteil versagt gänzlich durch eine Überbeanspruchung. Zudem ist die Degradation der mechanischen Eigenschaften eines Werkstoffes, in Form von Zusammenfall von Zugfestigkeit und Dehngrenze, hinsichtlich der Bauteilauslegung und -lebensdauer, als weitaus gefährlicher einzustufen. In diesem Fall würde der Werkstoff ohne oder nur sehr geringer plastischer Verformung versagen. Aufgrund des hohen numerischen Aufwands bei der Simulation der Werkstofftrennung wurde die Simulation der Wasserstoffdiffusion entkoppelt von der Rissimulation durchgeführt. Die Risskriterien wurden in Anlehnung an die erzielten Ergebnisse der Wasserstoffverteilung im Gefüge und den in *Abbildung 3.11* dargestellten Risskriterien gewählt. Da die austenitische Phase des Duplexstahls im Vergleich zur ferritischen Phase bei Wasserstoffkonzentrationen unterhalb von 10 wt.-ppm kaum an Duktilität verliert, wurde für alle simulierten Fälle von einer duktilen Werkstofftrennung im Austenit ausgegangen. Zumal die Anreicherung hoher Wasserstoffkonzentrationen im Austenit aufgrund des niedrigen Diffusionskoeffizienten sehr viel Zeit benötigt, wie nachfolgend in der Diskussion der Ergebnisse noch gezeigt wird. In der ferritischen Phase des Duplexstahls kann hingegen schnell eine kritische Wasserstoffkonzentration erreicht werden, da die ferritische Phase ein geringeres Lösungsvermögen und ein um bis zu fünf Zehnerpotenzen höheren Diffusionskoeffizienten besitzt. Aus diesen Gründen

wurde nur von einer Degradation der mechanischen Eigenschaften in der ferritischen Phase ausgegangen und die entsprechenden dehnungsbasierten Kriterien zwischen 0,5 % und 11 % Dehnung variiert.

Zur Durchführung der Rissanalyse wurden im Modell des Realgefüges vordefinierte Risspfade implementiert, *Abbildung 3.12*. Die Lage der Risspfade wurde anhand von kritischen Bereichen im Gefüge nach Betrachtung der aus den makroskopischen Verschiebungen resultierenden Spannungen und Dehnungen festgelegt. Begleitend dazu wurden mit der Element-Elimination-Technique (EET) Voruntersuchungen zur Ermittlung risskritischer Bereiche im Duplexgefüge durchgeführt. Die Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung erfolgte stets unter Nutzung der makroskopischen Verschiebungen aus der Zugprobe, wie es im *Kapitel 3.2.3* beschrieben ist. Bedingt durch die Vorgabe der Risspfade wurde ein Zusammenwachsen der Risse in unterschiedlichen Risspfaden hier zunächst nicht berücksichtigt. Die Betrachtung einer Rissbildung entlang der Phasengrenzen, bedingt durch die Akkumulation hoher Wasserstoffkonzentrationen, starker Dehnungsdifferenzen oder geringeren Trennfestigkeiten, kann aufgrund mangelnder Quantifizierung notwendiger Parameter nicht erfolgen.

Zur Auswertung der resultierenden phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen wurden die Elementwerte zusammen mit der jeweiligen Elementfläche für jeden Zeitschritt abgefragt, um den Mittelwert für die entsprechende Phase zu berechnen. Zudem wurde für eine einzelne Betrachtung der Phasenspannungen und -dehnungen an den Rissen ein kleiner Bereich um den jeweiligen Risspfad ausgewertet.



*Abbildung 3.12: Schematische Darstellung der Lage der Risspfade im Modell des Realgefüges*

### 3.3 Begleitende Experimente

Neben den numerischen Simulationen wurden auch begleitend Experimente mit wasserstoffbeladenen und wasserstofffreien Zugproben durchgeführt. Ziel der Untersuchung war es, makroskopisch und phasenspezifisch die eigenschaftsdegradierende Wirkung des Wasserstoffs im Duplexstahl zu ermitteln. Dazu wurden zunächst Zugproben aus einem gewalzten Blech angefertigt. Die Zugprobenrohlinge wurden mittels Wasserstrahlschneiden aus dem Blech quer zur Walzrichtung entnommen und anschließend auf das Endmaß von 3 mm x 3 mm im Prüfbereich geschliffen. Ein Teil der angefertigten Zugproben wurde entsprechend elektrochemisch mit Wasserstoff beladen. Die beladenen Zugproben wurden für einfache Zugversuche (*ex-situ*) als auch für *in-situ* Beugungsexperimente im Zugversuch verwendet. Die Möglichkeit für die Durchführung der Beugungsexperimente ergab sich eher spontan, da an einer fremden Messzeit partizipiert werden konnte. Aus der kurzen Vorbereitungszeit resultieren auch die etwas von der Norm abgewandelte Zugprobenform sowie die doch recht kurzen Zeiten für die Wasserstoffbeladung der Proben. Im Anschluss an die Beugungsexperimente wurden dann die *ex-situ* Zugversuche an der BAM durchgeführt. Diese Zugproben wurden für den Vergleich unter denselben Bedingungen mit Wasserstoff beladen. Nachfolgend wird die Durchführung der Experimente kurz erläutert.

Die Beladung der Zugproben mit Wasserstoff erfolgte über eine 0,1 M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> Lösung, versetzt mit Natriumarsenit (NaAsO<sub>2</sub>) als Rekombinationshemmer. Die Zugprobe wird dazu zusammen mit der Lösung in eine elektrochemische Zelle gegeben und ein konstanter Strom an die Probe angelegt. Über die Probenoberfläche stellt sich eine entsprechende Stromdichte ein. Als Gegenelektrode wurde eine Platinelektrode (Pt 1800 SI Analytics) verwendet. Die Zugprobe fungiert dabei als Arbeitselektrode und wird als Kathode geschaltet. Über die Höhe der Stromstärke bzw. die Beladungsdauer kann somit über diese galvanostatische Beladung eine entsprechende Wasserstoffkonzentration in der Zugprobe eingestellt werden. Die gewählten Parameter für die Beladung sind in *Tabelle 3.5* aufgelistet. Bis zur Durchführung der Zugprüfung wurden die wasserstoffbeladenen Proben in flüssigem Stickstoff bei -196 °C eingelagert, um die Effusion von Wasserstoff zu vermeiden. Vor Beginn der Versuche wurden die Proben in Alkohol aufgetaut.

Die Ermittlung der Wasserstoffkonzentration erfolgte über die Trägergas-Heißextraktion nach der DIN EN ISO 3690 [229] mit der Anlage Juwe H-mat 221 der Firma Bruker. Dabei werden die beladenen Proben in einem Infrarotofen auf unterschiedliche Temperaturen erwärmt und der desorbierte Wasserstoff zusammen mit einem Inertgasstrom über eine Wärmeleitfähigkeitszelle geführt. Nach vorheriger Kalibration lassen sich so über die Unterschiede in der Wärmeleitfähigkeit die Wasserstoffgehalte in Abhängigkeit des Probengewichtes ermitteln. Zudem ist die Unterscheidung in diffusiblem und getrapptem Wasserstoff möglich.

Die Proben des Parametersatzes BESSY wurden für die *in-situ* Beugungsexperimente genutzt, wobei eine Probe als Referenzprobe diente, um einen eventuellen Wasserstoffverlust während der *in-situ* Zugprüfung festzustellen. Die Proben der Parametersätze BAM 1 und BAM 2 wurden für *ex-situ* Zugversuche genutzt. Eine Vorstudie zur Sicherstellung der homogenen Durchsättigung der Zugproben ist aus Zeitgründen nicht erfolgt. Eine Evaluierung sinnvoller Parameter zur Wasserstoffbeladung aus der Literatur ist nur bedingt mög-

lich, da die resultierende Konzentration in der Probe entscheidend von den Beladungsparametern sowie der Zusammensetzung des Elektrolyten abhängt.

Tabelle 3.5: Parameter der kathodischen Wasserstoffbeladung

Parametersatz	Stromdichte in mA·cm <sup>-2</sup>	Beladungszeit in h	Probenanzahl
BESSY	7,5	72	3
BAM 1	7,5	96	2
BAM 2	15,0	96	2

Die Ermittlung der phasenspezifischen Eigenschaften des Duplexstahls erfolgte über energiedispersive Beugungsexperimente mit hochenergetischer Röntgenstrahlung an der Beamline EDDI im BESSY am Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB). Mit der hier zur Verfügung stehenden hochenergetischen Strahlung ist es möglich, die Zugprobe im Prüfbereich (3 mm) zu durchstrahlen und die phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen im Messvolumen zu erfassen. Bedingt durch die Möglichkeit der energiedispersiven Messung können dabei gleichzeitig Informationen aus mehreren Gitterebenen beider Phasen gewonnen werden. Der Versuchsaufbau am Versuchsstand EDDI ermöglicht in-situ während eines Zugversuches die Ermittlung der Spannungen und Dehnungen in der austenitischen und ferritischen Phase des Duplexstahls. Die Zugprobe wird dafür in eine Zugprüfeinrichtung eingespannt, welche auf eine Eulerwiege montiert ist und sich somit um 90° kippen lässt ( $\psi$ ), *Abbildung 3.13*. Der Primärstrahl (weiß) trifft auf die Probe und wird in einem für das Experiment charakteristischen Winkel ( $2\Theta$ ) an der Probe gebeugt. Der so gebeugte Sekundärstrahl (grün) wird dann über einen Detektor erfasst und in ein energiedispersives Spektrum überführt, *Abbildung 3.14*. Das Spektrum zeigt Häufigkeitsverteilungen auftretender Signale (Intensitäten), die über die Energie abgetragen werden. Die Energielage der Intensitäten kann über die charakteristische Wellenlänge der Strahlung und der Bragg-Gleichung (*Gleichung (3.6)*) in den Gitterparameter überführt werden. Dabei wurde für die Auswertung der Diffraktogramme auf eine an der Beamline vorhandene Software, basierend auf Mathematica<sup>®</sup>, zurückgegriffen.

$$n\lambda = 2 \cdot d_{hkl} \cdot \sin\Theta_{hkl}, \quad (3.6)$$

mit  $n\lambda$ : ganzzahliges Vielfaches der Wellenlänge,  $d_{hkl}$ : Gitterabstand der Netzebenenschar  $hkl$  und  $\Theta$ : Bragg-Winkel. Durch Einsetzen der Beziehung

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (3.7)$$

in die Bragg-Gleichung ergibt sich:

$$d_{hkl} = \frac{h \cdot c}{2 \cdot \sin\Theta_{hkl}} \cdot \frac{1}{E_{hkl}} = \text{const.} \cdot \frac{1}{E_{hkl}}, \quad (3.8)$$

mit  $E$ : der Energie,  $h$ : das Plancksche Wirkungsquantum und  $c$ : die Lichtgeschwindigkeit.

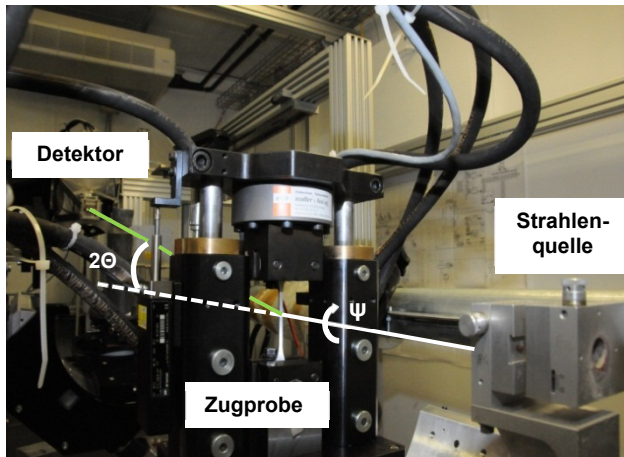


Abbildung 3.13: Versuchsaufbau am Versuchsstand EDDI im BESSY, kippbare Zugprüfmaschine mit eingespannter Zugprobe

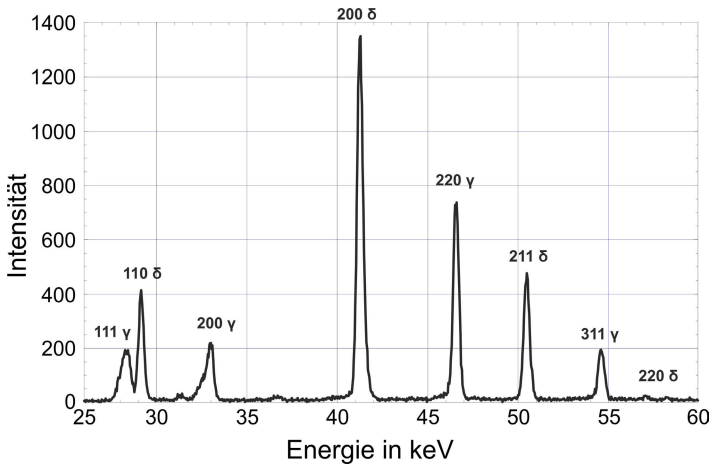


Abbildung 3.14: Energiedispersives Spektrum des Duplexstahls X2CrNiMoN 22-5-3 unter einem  $2\theta$ -Winkel von  $10,3^\circ$  (eigene Untersuchungen)

Für die Messung wird der Zugversuch an verschiedenen Punkten der zuvor ermittelten Fließkurve unterbrochen und ein Spektrum aufgenommen. Über die Veränderung der Atomabstände in den verschiedenen Netzebenen beider Phasen lassen sich Aussagen zu den vorliegenden Dehnungen treffen. Mit Hilfe der Grundgleichung der Röntgenographischen Spannungsanalyse (Gleichung (3.9)) und unter der Annahme eines ebenen Spannungszustandes lassen sich über elastische Konstanten ( $s_1$  und  $s_2$ ) aus diesen Dehnungen die vorliegenden phasenspezifischen Spannungsmittelwerte berechnen [230]. Durch Kippen der Probe in äquidistanten Winkeln  $\psi$  von  $0^\circ$  bis  $90^\circ$  im Strahlengang können die Spannungsmittelwerte in Längsrichtung (Belastungsrichtung) und Querrichtung unter einem festgelegten Azimutwinkel  $\phi$  mit der  $\sin^2\psi$ -Methode [231] bestimmt werden. Die für die Zugversuche genutzten Mess- und Auswerteparameter sind in *Tabelle 3.6* angegeben.



$$\varepsilon_{\phi\psi}(hkl) = \frac{1}{2} s_2(hkl) \cdot \sigma_{\phi}^P \sin^2\psi + s_1(hkl) \cdot (\sigma_{11}^P + \sigma_{22}^P) \quad (3.9)$$

Über diese Vorgehensweise wurde versucht, die Einflüsse des Wasserstoffs auf die mechanischen Eigenschaften der Phasen des Duplexstahls unter makroskopischer Belastung zu ermitteln. Da diese Experimente nicht primäres Ziel der vorliegenden Arbeit waren, soll hier nicht im Detail auf die Durchführung der Beugungsexperimente oder die Grundlagen der röntgenographischen Spannungsanalyse eingegangen werden. Für weitere, ausführlichere Informationen sei auf das Buch „Moderne Röntgenbeugung“ [230] verwiesen.

Tabelle 3.6: Mess- und Auswerteparameter der Messungen mittels energiedispersiver Synchrotronstrahlung der Zugprobe

Messmethode	$\sin^2\psi$
Primärstrahl	1 · 1 mm <sup>2</sup>
Sekundärstrahl	0,1 · 7 mm <sup>2</sup> (äquatorial · axial)
Beugungswinkel	2 $\Theta$ = 10,3°
Messmodus	Transmission
$\psi$ -Bereich	0° bis 90° (11 Kippungen)
Messrichtung	$\phi$ = 0°; Zugprobenlängsrichtung
Zählzeit	60s/Spektrum
Beugungslinien	$\delta$ -Ferrit: 200, 211, 220, 310, 321 Austenit: 220, 222, 311, 331, 400, 420
Diffractionselastische Konstanten	$S_1(hkl)$ und $\frac{1}{2}s_2(hkl)$ berechnet aus Einkristallkonstanten (Eshelby/Kröner)
Auswertung	Peak Fit: Pseudo Voigt, Gauß
Kalibrierung	Wolframpulver

Bekanntlich führt das Abschrecken der Duplexwerkstoffe während der Herstellung zu thermisch bedingten Eigenspannungen in den Phasen, *Kapitel 2.2*. Es ist also nicht auszuschließen, dass durch die Lagerung des Duplexstahls in Flüssigstickstoff bei -196 °C die bereits im Gefüge vorliegenden Eigenspannungen beeinflusst werden und es somit zu einer Umlagerung der Eigenspannungen oder zur plastischen Verformungen in der austenitischen oder ferritischen Phase kommt. Zur Überprüfung dieser Vermutung wurden aus dem Grundwerkstoff mittels Drahterodieren dünne Plättchen mit den Abmessungen 10 x 10 x 0,2 mm<sup>3</sup> gefertigt. In drei dieser Proben wurden zunächst die Eigenspannungen röntgenographisch gemessen. Anschließend erfolgte eine Einlagerung der Proben in Flüssigstickstoff für 15 Minuten. Nach dem Auftauen der Proben wurden erneut die phasenspezifischen Eigenspannungen gemessen. Die Durchführung der Messung erfolgte am HZB mit einer Ersatzquelle zur Bereitstellung der Röntgenstrahlung, da gerade Umbaumaßnahmen stattfanden. Die Eigenspannungen in den Proben wurden im Reflexionsmodus für vier Messrichtungen aufgenommen. Die Mess- und Auswerteparameter sind in *Tabelle 3.7* aufgelistet.

### 3 Numerischer Ansatz

Tabelle 3.7: Mess- und Auswerteparameter der Messungen mittels Röntgenstrahlung an den Plättchen aus Duplexstahl

Messmethode	$\sin^2\psi$
Primärstrahl	Kollimator ( $\varnothing = 0,8$ mm, Länge 200 mm)
Sekundärstrahl	Soller ( $0,15^\circ$ , Länge 125 mm)
Strahlung	Wolfram (Röntgenröhre)
Strom	45 mA
Spannung	60 kV
Beugungswinkel	$2\Theta = 16^\circ$
Messmodus	Reflexion
$\psi$ -Bereich	$0^\circ$ bis $90^\circ$ (10 Kippungen)
Messrichtung	$\phi = 0^\circ$ ; $\phi = 90^\circ$ ; $\phi = 180^\circ$ ; $\phi = 270^\circ$
Zählzeit	2000s/Spektrum
Beugungslinien	$\delta$ -Ferrit: 110, 200, 211, 220, 222, 310 Austenit: 111, 200, 220, 222, 311, 420
Diffractionselastische Konstanten	$S_1(hkl)$ und $\frac{1}{2}S_2(hkl)$ berechnet aus Einkristallkonstanten (Eshelby/Kröner)
Auswertung	Peak Fit: Pseudo Voigt, Gauß
Kalibrierung	Goldpulver

## 4 Ergebnisse und Diskussion

Nachfolgend werden die numerischen und experimentellen Ergebnisse dargestellt und diskutiert. Zunächst wird der Wasserstofftransport im Duplexgefüge des Grundwerkstoffes und des Schweißgutes erörtert. Anschließend wird auf die Spannungs-Dehnungs-Verteilung im Duplexgefüge des Grundwerkstoffes eingegangen und kritische Bereiche für die Initiierung einer Werkstoffschädigung aufgezeigt. Weiterhin wird auf die Ergebnisse der simulierten Werkstoffschädigung eingegangen. Abschließend sollen die wichtigsten Ergebnisse noch einmal zusammengefasst und die daraus ableitbaren Schlussfolgerungen herausgestellt werden.

### 4.1 Wasserstofftransport im Duplexstahl

Bevor auf die Ergebnisse der numerischen Simulation des Wasserstofftransports im Duplexgefüge eingegangen wird, soll zunächst noch einmal anhand eines einfachen numerischen Modells die Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration von der Ausgangskonzentration (siehe Kapitel 3.2.2) dargestellt werden. Dafür wurden zwei Simulationen mit unterschiedlichen Ausgangskonzentrationen,  $HD_0 = 2 \text{ Nml}/100 \text{ g Fe}$  und  $HD_0 = 30 \text{ Nml}/100 \text{ g Fe}$ , bei sonst gleichen Randbedingungen und mit dem gleichen Modell durchgeführt. Ausgewertet wurde die zeitlich abhängige Sättigung des Modells durch Division der Summe aus Elementkonzentration multipliziert mit der jeweiligen Fläche des Elements durch die Gesamtfläche des Modells. Das Phasenverhältnis im Modell war 50 % Austenit zu 50 %  $\delta$ -Ferrit, wobei der oberen Hälfte des zweidimensionalen Modells die Eigenschaften des  $\delta$ -Ferrits zugewiesen wurden. Die Ausgangskonzentration wurde in Form einer Dirichletschen Randbedingung jeweils auf die Knoten am rechten Rand des Modells aufgebracht. Die restlichen freien Ränder wurden adiabatisch gehalten. Für die Simulation wurde davon ausgegangen, dass beide Phasen ein Lösungsvermögen in Höhe der Ausgangskonzentration haben. Die Wasserstoffverteilung für beide Fälle nach zwölfstündiger Beladung ist in *Abbildung 4.1* dargestellt.

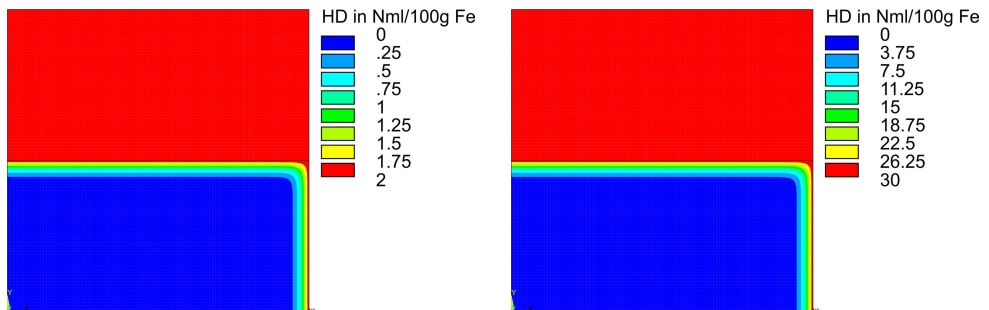


Abbildung 4.1: Simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration im einfachen Modell für  $HD_0 = 2 \text{ Nml}/100 \text{ g Fe}$  (links) und  $HD_0 = 30 \text{ Nml}/100 \text{ g Fe}$  (rechts) nach 12 h Beladung

Das Profil der simulierten Verteilung der Wasserstoffkonzentrationen ist in beiden Fällen gleich. Während die ferritische Phase jeweils vollständig mit der Ausgangskonzentration gesättigt ist, erfährt die austenitische Phase hingegen keine Sättigung. Dies ist durch den höheren Diffusionskoeffizienten der ferritischen Phase bedingt. Dadurch wird hier schnell

die jeweilige Sättigungskonzentration erreicht. In der austenitischen Phase wird dafür weit aus mehr Zeit benötigt.

Bei Betrachtung des Verlaufs der auf die Ausgangskonzentration normierten Sättigung des Modells ist zu sehen, dass die Kurven beider Modelle identisch sind, *Abbildung 4.2*. Dies zeigt, dass die im Modell vorliegende Wasserstoffkonzentration an einem ausgewählten Ort im Modell, zur gleichen Zeit, bei identischen Diffusionskoeffizienten allein von der Ausgangskonzentration abhängig ist. Prozentual gesehen wird immer der gleiche Anteil an Wasserstoff von der Ausgangskonzentration innerhalb einer bestimmten Zeit im Modell transportiert. Die schnelle Sättigung der ferritischen Phase ist ebenfalls in *Abbildung 4.2* ersichtlich. Innerhalb kürzester Zeit ist die ferritische Phase vollständig und somit das Modell zu 50 % gesättigt. Die austenitische Phase nimmt nur sehr langsam Wasserstoff auf und die Gesamtsättigung steigt allmählich weiter an.

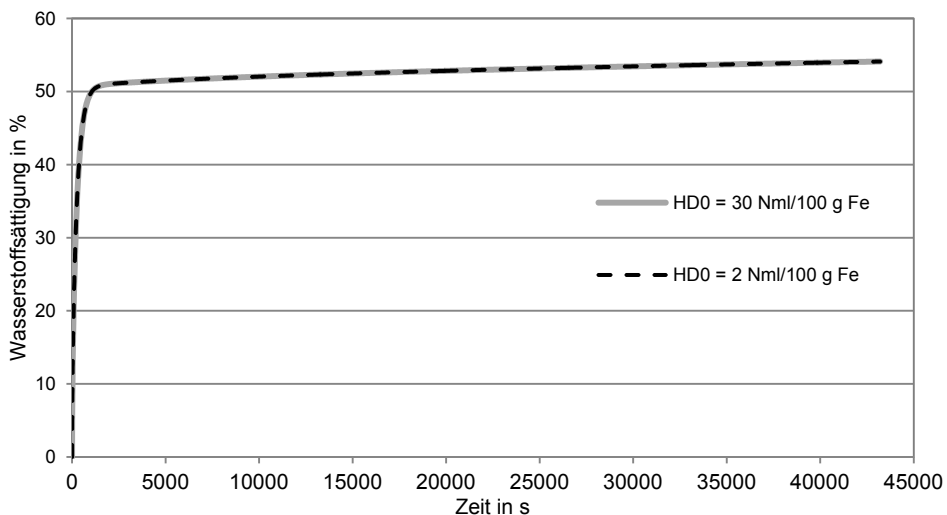


Abbildung 4.2: Normierter Verlauf der Sättigung im einfachen Modell

### 4.1.1 Wasserstofftransport im Grundwerkstoff des Duplexstahls

#### 4.1.1.1 Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Gefügeorientierung

Wie bereits von einigen Autoren [106, 107] gezeigt, hängt der Wasserstofftransport im Duplexstahl sehr stark von der Orientierung bzw. Anordnung der austenitischen und ferritischen Phase ab. Zur Ermittlung dieser Abhängigkeiten und deren Auswirkung auf die Wasserstoffverteilung im Gefüge wurde eine Wasserstoffdiffusion längs und quer zur Orientierung der Phasen simuliert. Die Simulation der Wasserstoffdiffusion erfolgte daher mit drei unterschiedlichen Randbedingungen, d.h., für die Diffusion längs und quer zur Gefügeorientierung wurde das Modell nur am rechten Rand bzw. am oberen Rand mit Wasserstoff beladen. Zudem wurde für einen Vergleich das Modell auch von allen vier Seiten gleichzeitig beladen. In *Abbildung 4.3* ist die simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration im Grundwerkstoff des Duplexstahls für die Beladungszeiten 100 s, 1 h und

12 h und die Beladung des Gefüges längs der Gefügeorientierung (Beladung am rechten Rand) sowie quer zur Gefügeorientierung (Beladung am oberen Rand) dargestellt.

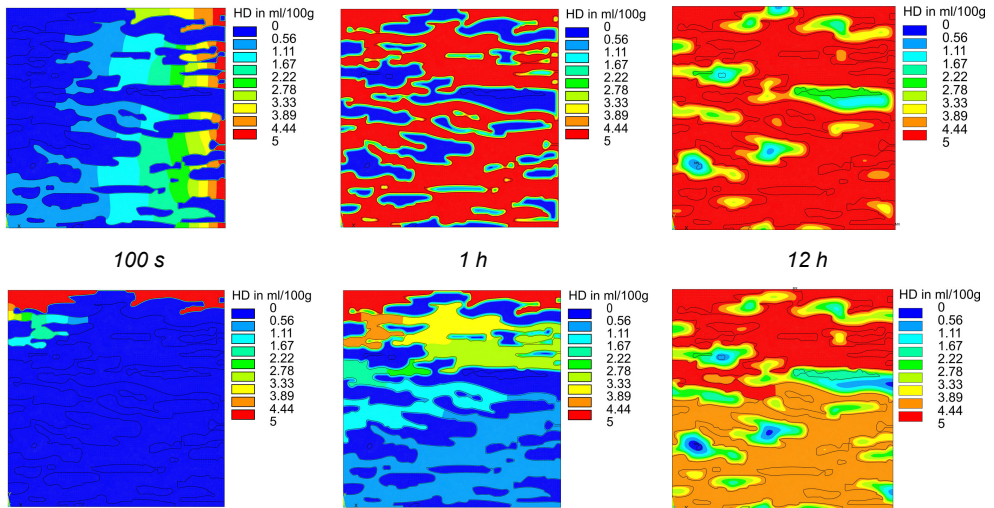


Abbildung 4.3: Simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration in Abhängigkeit von der Gefügeorientierung (Diffusion längs der Orientierung – obere Bildreihe, Diffusion quer zur Orientierung – untere Bildreihe)

Zu sehen ist, dass in beiden Fällen der Wasserstoff im Ferrit weitaus schneller diffundiert als im Austenit. Bedingt wird dieses Verhalten durch die unterschiedlichen Transporteigenschaften der Phasen für Wasserstoff. Der Diffusionskoeffizient der ferritischen Phase ist um fünf Größenordnungen höher als im Austenit, weshalb die Wasserstoffdiffusion im Austenit mehr Zeit benötigt. Der Wasserstofftransport im Duplexgefüge findet also hauptsächlich über die ferritische Phase statt und die austenitischen Phasenanteile wirken hierbei als Hindernis für die Wasserstoffdiffusion. Während für den Fall der Diffusion längs der Orientierung des Gefüges die Diffusionswege im Ferrit von der einen Seite des Modells zur anderen Seite reichen, sind die Diffusionspfade im Ferrit quer zur Gefügeorientierung durch austenitische Inseln unterbrochen bzw. der Pfad im Ferrit ist stark verwunden. Daraus ergeben sich längere Diffusionswege im Ferrit quer zur Gefügeorientierung und somit auch eine längere Zeit für die Sättigung des Gefüges. Die Diffusion mit der Orientierung des Gefüges ist daher weitaus schneller als die Diffusion quer zur Gefügeorientierung. Bereits nach einer Beladungszeit von einer Stunde ist eine homogene Wasserstoffverteilung in Höhe der Ausgangskonzentration von 5 Nml/100 g Fe in der ferritischen Phase erreicht. Hingegen sind zur gleichen Zeit bei der Diffusion quer zur Gefügeorientierung nur im oberen Drittel des Modells höhere Wasserstoffkonzentrationen vorhanden. Somit wird im Fall der Diffusion längs der Orientierung die ferritische Phase schneller gesättigt und das Risiko für eine wasserstoffunterstützte Werkstofftrennung ist stark erhöht. Erst mit zunehmender Zeit diffundiert der Wasserstoff auch in die austenitische Phase. Der schnelle Transport und die homogene Verteilung von Wasserstoff in der ferritischen Phase des Duplexstahls konnte auch von mehreren Autoren über die Mikroprint-Technik bestätigt werden [108–110]. Dieses Verhalten zeigt, dass die bestimmenden Faktoren für den Wasserstofftransport im Duplexgefüge die Diffusion des Wasserstoffs in der ferritischen Phase sowie die Länge der

Diffusionswege im  $\delta$ -Ferrit sind. Zudem spielt auch die Größe und Form der austenitischen Phase als auch das Phasenverhältnis für die Diffusion im Duplexstahl eine wesentliche Rolle.

Die Abhängigkeit der Wasserstoffdiffusion von der Anordnung der austenitischen und ferritischen Phase im Duplexgefüge wurde auch in den Untersuchungen von Turnbull und Hutchings [106] beschrieben. Die Autoren führen daher für die Berechnung ihrer Diffusionskoeffizienten in Duplexstählen einen Tortuositätsfaktor ein, um dem verwundenen Diffusionspfad im  $\delta$ -Ferrit Rechnung zu tragen. Dabei beschreibt der Faktor die Behinderung des Wasserstofftransports durch austenitische Inseln bzw. berücksichtigt der Faktor den längeren Diffusionsweg in der ferritischen Phase. Zudem berichten die Autoren, dass der effektive Diffusionskoeffizient auch durch Festsetzen (trappen) des Wasserstoffs an der austenitisch-ferritischen Phasengrenze herabgesetzt wird und daher der effektive Diffusionskoeffizient des Gesamtgefüges niedriger ist als in rein ferritischen Vergleichswerkstoffen.

Die Autoren Owczarek und Zakroczymski [107] greifen die Idee des verwundenen Diffusionspfades für die Berechnung der effektiven Diffusionskoeffizienten im Duplexstahl auf. Sie nutzten für die Analyse des Diffusionsverhaltens von Wasserstoff im Duplexstahl Permeationsexperimente mit Permeationsproben unterschiedlicher Dicke. Sie beschreiben die Abhängigkeit der Diffusionskoeffizienten von der Länge des Diffusionsweges in der ferritischen Phase. Mit zunehmender Dicke der Probe nehmen die Diffusionskoeffizienten ab. Die Autoren führen dies auf die Unterbrechung der Diffusionswege im  $\delta$ -Ferrit durch austenitische Inseln zurück. Auf Grundlage der zusätzlich durchgeführten Desorptionsexperimente können die Autoren auch zwischen diffusiblem Wasserstoff im  $\delta$ -Ferrit und getrapptem Wasserstoff im Austenit unterscheiden, da in dünnen Permeationsproben die Diffusion des Wasserstoffs im Austenit für den Effusionsprozess entscheidend ist. Mit zunehmender Dicke geht dieser Effekt verloren und der Transport des Wasserstoffs im Ferrit ist der bestimmende Faktor der Wasserstoffdiffusion.

Für einen Vergleich wurde mit dem Modell des Realgefüges des Grundwerkstoffes auch eine Beladung von allen vier Seiten im Modell simuliert. Für alle Simulationen wurde eine Ausgangskonzentration von 5 Nml/100g Fe angenommen. Die prozentuale Sättigung des Modells in Abhängigkeit von der Diffusionsrichtung ist in *Abbildung 4.4* dargestellt. Die Zeitachse wurde auf 100 000 Sekunden begrenzt, um die Unterschiede in der Sättigung zu Beginn der Diffusion zu verdeutlichen. Der steile Anstieg zu Beginn der Diffusion wird durch den schnellen Wasserstofftransport und die schnelle Sättigung in der ferritischen Phase bedingt. Daher steigt die Kurve innerhalb kurzer Zeit auf ca. 55 %, bevor der Anstieg der Kurve zunehmend geringer wird. Durch die homogene Verteilung des Wasserstoffs in der ferritischen Phase des Werkstoffes diffundiert auch mit zunehmender Zeit Wasserstoff in die austenitische Phase. Dies geschieht aufgrund des geringen Diffusionskoeffizienten im Austenit nur sehr langsam, weshalb der Anstieg der Kurven abnimmt.

Im Fall der Diffusion von allen Seiten des Modells und der Diffusion längs der Gefügeorientierung (Diffusion vom rechten Rand) ist zu sehen, dass die Kurven einen sehr ähnlichen Verlauf haben und sehr nah beieinander liegen. Im Vergleich dazu ist ein klarer Unterschied zur Diffusion quer zur Orientierung des Gefüges zu erkennen, was die starke Abhängigkeit des Wasserstofftransports von der Gefügeorientierung noch einmal verdeutlicht.

Makroskopisch gesehen würde sich für diesen Fall ein weitaus geringerer effektiver Diffusionskoeffizient ergeben.

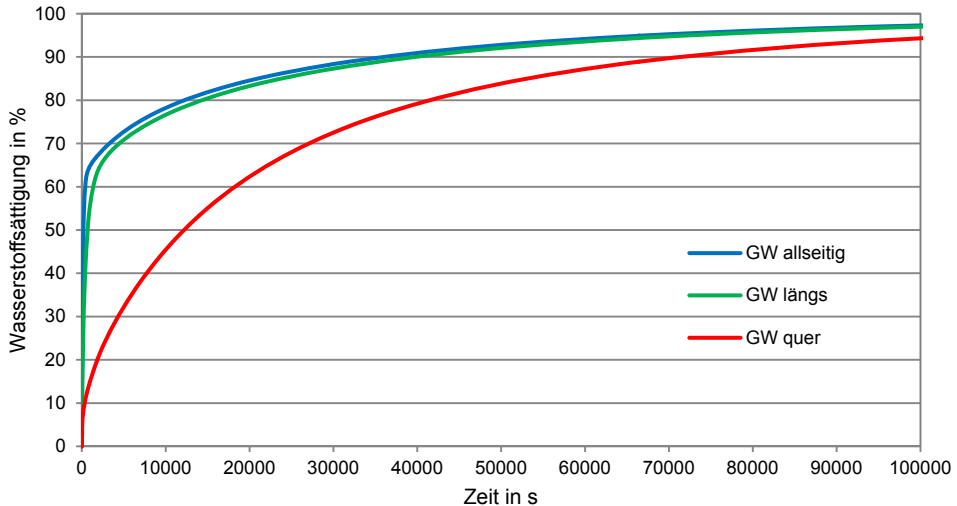


Abbildung 4.4: Vergleich der Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Orientierung des Gefüges im Grundwerkstoff (GW) des Duplexstahls

Zur Verdeutlichung der schnellen Sättigung der ferritischen Phase, der langsameren Diffusion im Austenit sowie der Abhängigkeit der Wasserstoffdiffusion von der Orientierung des Gefüges sind die phasenspezifische Verläufe der Sättigung in *Abbildung 4.5* für die Diffusion längs und quer für eine zwölfstündige Beladung dargestellt. Deutlich zu sehen ist die schnelle Sättigung der ferritischen Phase im Fall der Diffusion längs der Orientierung (grüne Kurven). Während in der ferritischen Phase (Ferrit) innerhalb kürzester Zeit nahezu 100 % Sättigung erreicht sind, diffundiert der Wasserstoff auch vom  $\delta$ -Ferrit langsam in den Austenit (Austenit) und die Gesamtsättigung (Duplex) nimmt zu. Die vollständige Sättigung zwischen 95 % und 100 % wird in der ferritischen Phase nur langsam erreicht, da einzelne  $\delta$ -Ferritinseln vollständig von Austenit umschlossen sind und der Wasserstoff erst durch die austenitische Phase zum  $\delta$ -Ferrit transportiert werden muss. Im Austenit selbst erhöht sich die Wasserstoffkonzentration nur allmählich und eine vollständige Sättigung kann innerhalb von 12 Stunden nicht erreicht werden. Im Fall der Diffusion quer zur Gefügeorientierung (rote Kurven) ist zu sehen, dass die Wasserstoffdiffusion im  $\delta$ -Ferrit weitaus langsamer abläuft im Vergleich zur Beladung längs der Orientierung. Dies resultiert aus dem verwundenen Diffusionspfad für diese Beladungsbedingung. Die gesamte ferritische Phase wird nur über den oberen linken Bereich im Modell des Realgefüges mit Wasserstoff versorgt (*Abbildung 4.3*, untere Bildreihe). Bedingt durch die makroskopisch langsamere Diffusion im Gefüge, wird auch mehr Zeit für die Diffusion des Wasserstoffs in die austenitische Phase benötigt, da ein Großteil des Wasserstoffs für die Sättigung der austenitischen Phase langsamer über den  $\delta$ -Ferrit antransportiert wird. Aus diesem Grund wird für die Diffusion quer zur Gefügeorientierung auch nur eine Sättigung von maximal 80 % im Gefüge innerhalb von 12 Stunden erreicht. Hingegen bei der Beladung längs der Orientierung kann eine Sättigung von 90 % erreicht werden.

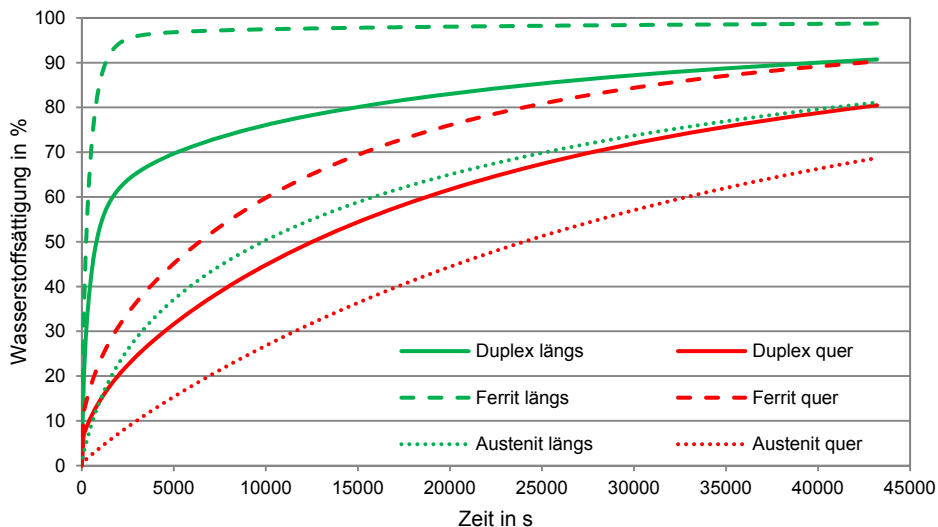


Abbildung 4.5: Vergleich der phasenspezifischen Wasserstoffdiffusion in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls für die Beladung längs und quer zur Gefügeorientierung

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass der Transport von Wasserstoff im Duplexgefüge primär über die ferritische Phase erfolgt, da der Diffusionskoeffizient um bis zu fünf Dekaden höher ist als im Austenit. Daher ist der  $\delta$ -Ferrit innerhalb kürzester Zeit mit Wasserstoff gesättigt, hingegen benötigt die Sättigung bzw. Diffusion im Austenit weitaus mehr Zeit. Zudem ist eine starke Abhängigkeit des Wasserstofftransports von der Orientierung des Gefüges bzw. der Walzrichtung zu erkennen, wobei die Diffusion längs der Orientierung schneller verläuft. Aus diesen Gründen ist mit einem hohen Risiko der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in der ferritischen Phase zu rechnen.

#### 4.1.1.2 Einfluss von Trapping und Enhancing an der Phasengrenze

Das Verhalten der Phasengrenze in Bezug auf die Diffusion von Wasserstoff wird in der Literatur kontrovers diskutiert. Zum einen wird der Phasengrenze sowie der Korngrenze eine erhöhte Diffusion zugesprochen [104, 123]. Zum anderen wird die austenitisch-ferritische Phasengrenze als Wasserstofffalle bezeichnet [77, 106, 116, 119], wobei sich beide Fälle nicht ausschließen müssen. Bedingt durch den „lockeren“ Atomverbund an der Phasengrenze kann der Wasserstoff sich hier freier bewegen als im Gitter selbst. Dennoch wird eine höhere Aktivierungsenergie benötigt, damit der Wasserstoff die Phasengrenze wieder verlässt und im Gitter diffundiert. Um die Auswirkung von Trapping oder Enhancing auf das Transportverhalten und die Wasserstoffverteilung im Gefüge zu überprüfen, wurden zusätzliche Simulationen mit den drei bisherigen Randbedingungen am Modell des Grundwerkstoffes durchgeführt. Zur Berücksichtigung der Effekte wurden den Elementen an der Phasengrenze entsprechende Diffusionskoeffizienten (Tabelle 3.3) als Werkstoffeigenschaft vorgegeben. Die Ergebnisse der numerischen Simulation für den Fall von Trapping an der Phasengrenze sind in Abbildung 4.6 vergleichend den Ergebnissen ohne Trapping gegenübergestellt. Zu sehen ist, dass unabhängig von der Beladungsrichtung nur etwa die Hälfte des Modells in der gleichen Zeit gesättigt wird als im Fall ohne Trapping. Das heißt,



dass nur die ferritische Phase vollständig mit Wasserstoff gesättigt wurde und die Phasengrenze als zusätzliche Barriere für die Diffusion von Wasserstoff in die austenitische Phase wirkt. Erst wenn die Phasengrenze gesättigt wurde bzw. sich ein stationärer Zustand eingestellt hat, diffundiert mit zunehmender Zeit Wasserstoff in den Austenit.

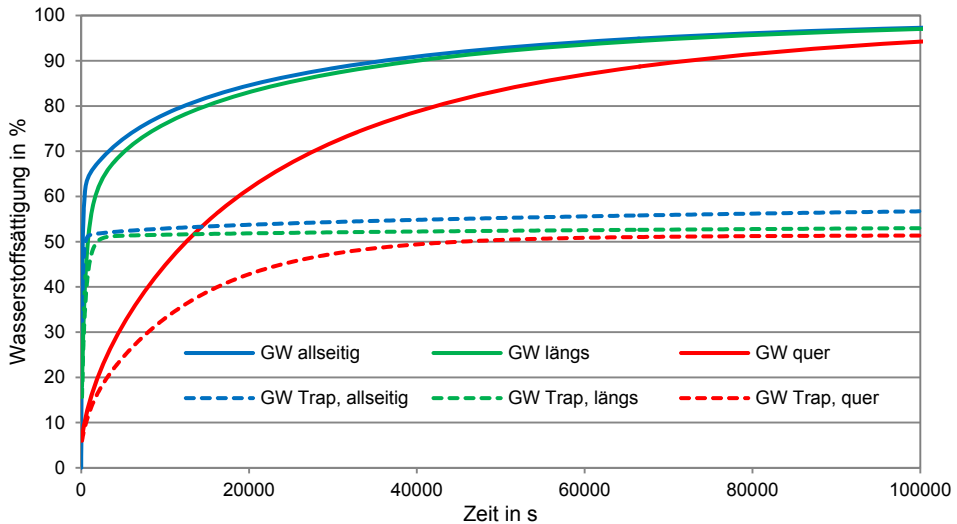


Abbildung 4.6: Vergleich der Wasserstoffdiffusion unter Berücksichtigung von Trapping an der Phasengrenze (gestrichelte Linien) zur Diffusion ohne Trapping im Grundwerkstoff (GW)

Die Wasserstoffverteilung im Gefüge für erhöhte Diffusion an der Phasengrenze ist im Vergleich zum Trapping an der Phasengrenze und zur unbeeinflussten Diffusion für die Beladung des Modells längs der Gefügeorientierung in *Abbildung 4.7* dargestellt. Die simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration im Grundwerkstoff des Duplexstahls ist für die jeweilige Beladungszeit von 12 Stunden in *Abbildung 4.8* gezeigt.

Wie dem Diagramm in *Abbildung 4.7* zu entnehmen ist, wird durch eine beschleunigte Diffusion an der Phasengrenze nur zu Beginn der Beladung eine schnellere Sättigung des Gefüges erreicht. Bei vollständiger Sättigung der ferritischen Phase nach ca. 12 Stunden (43 200 s) und zunehmend langsamer Diffusion des Wasserstoffs in den Austenit gleichen sich die Kurven der beschleunigten Diffusion und die Kurve der unbeeinflussten Diffusion wieder an. Die Unterschiede in der Wasserstoffverteilung sind in diesen Fällen nicht gravierend. Jedoch muss in Bezug auf eine wasserstoffunterstützte Werkstofftrennung darauf hingewiesen werden, dass dennoch eine erhöhte Gefahr für eine Rissbildung besteht. Die Rissinitiierung setzt häufig an der Phasengrenze ein (siehe *Kapitel 2.3.3*). Zudem können Versetzungen Wasserstoff an der Phasengrenze aufnehmen und somit auch etwas schneller im Werkstoff verteilen, wenn zum Beispiel eine zusätzliche mechanische Beanspruchung des Gefüges erfolgt.

Im Fall von Trapping an der Phasengrenze ist zu sehen, dass nach 12 Stunden Beladung nahezu kein Wasserstoff in die austenitische Phase diffundiert ist. Lediglich am rechten Rand des Modells, von dem aus die Beladung des Gefüges erfolgt, ist eine höhere Wasserstoffkonzentration im Austenit des Duplexstahls auszumachen, *Abbildung 4.8b*. Für die

simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration für die beschleunigte Diffusion an der Phasengrenze ist nach 12 Stunden Beladung nahezu kein Unterschied zur Wasserstoffverteilung ohne beeinflussende Effekte zu sehen, *Abbildung 4.8c*.

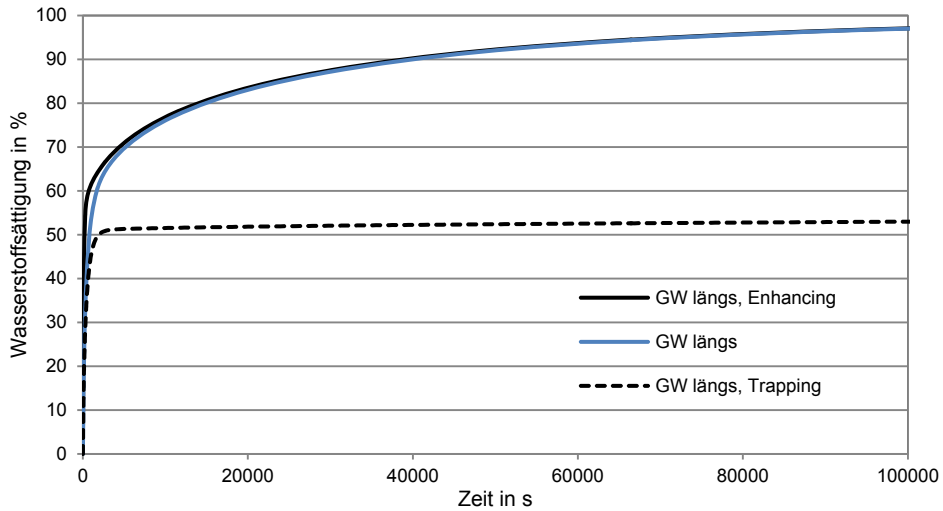


Abbildung 4.7: Vergleich der Wasserstoffdiffusion im Grundwerkstoff (GW) mit Trapping (schwarze Linie gestrichelt) oder Enhancing (schwarze Linie) zur unbeeinflussten Diffusion (blaue Linie)

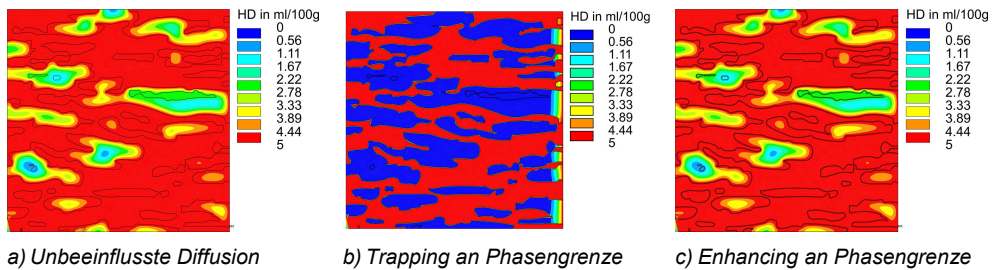


Abbildung 4.8: Vergleich der Wasserstoffdiffusion im Grundwerkstoff nach zwölfstündiger Beladung längs der Gefügeorientierung a) ohne Trapping und Enhancing, b) Trapping an der Phasengrenze und c) Enhancing an der Phasengrenze

Die Ergebnisse zeigen, dass eine beschleunigte Diffusion an der Phasengrenze zu Beginn der Wasserstoffeinbringung eine etwas schnellere Sättigung der ferritischen Phase bewirkt. Ist im  $\delta$ -Ferrit des Duplexstahls erst eine homogene Wasserstoffverteilung erreicht, ist der Effekt der beschleunigten Diffusion im Vergleich zur unbeeinflussten Diffusion nicht mehr unterscheidbar. Jedoch kann dies zu einer früheren Rissbildung führen, da die Rissinitiierung in Duplexstählen zumeist an der Phasengrenze im  $\delta$ -Ferrit einsetzt [60] und eine höhere Wasserstoffkonzentration dies begünstigen würde. Im Fall des Trapping von Wasserstoff an der Phasengrenze ist jedoch ein deutlicher Unterschied zu den beiden anderen Fällen erkennbar. In diesem Fall ist nach der gleichen Beladungszeit von 12 Stunden nur in der ferritische Phase eine homogene Wasserstoffverteilung erreicht worden. Hier wirkt die Phasengrenze als zusätzliche Barriere für den Wasserstoffeintritt in die austeniti-

sche Phase, in der ohnehin nur ein langsamer Wasserstofftransport stattfindet. Daher ist kaum Wasserstoff in den Austenit diffundiert und es wird mehr Zeit für eine homogene Verteilung des Wasserstoffs im Duplexgefüge benötigt. Dies sollte bei der elektrochemischen Beladung von Duplexstählen berücksichtigt werden. Um im gesamten Werkstoff eine nahezu homogene Wasserstoffkonzentration zu erreichen, sind längere Beladungszeiten einzukalkulieren.

#### 4.1.1.3 Effusion von Wasserstoff

Das Diffusionsverhalten im Duplexstahl lässt sich auch auf die Effusion von Wasserstoff übertragen. Ausgehend von einer homogenen Wasserstoffverteilung der Ausgangskonzentration von  $HD_0 = 5 \text{ Nml}/100\text{g Fe}$  in der austenitischen und ferritischen Phase, wurde die Effusion zu allen Seiten im Modell durch die Randbedingung  $HD = 0$  an den Randknoten simuliert. Der Wasserstoff effundiert zuerst sehr schnell aus der ferritischen Phase des Duplexstahls. Im Austenit verbleiben jedoch hohe Mengen an Wasserstoff, welche nur sehr langsam aus dem Austenit effundieren, *Abbildung 4.9*.

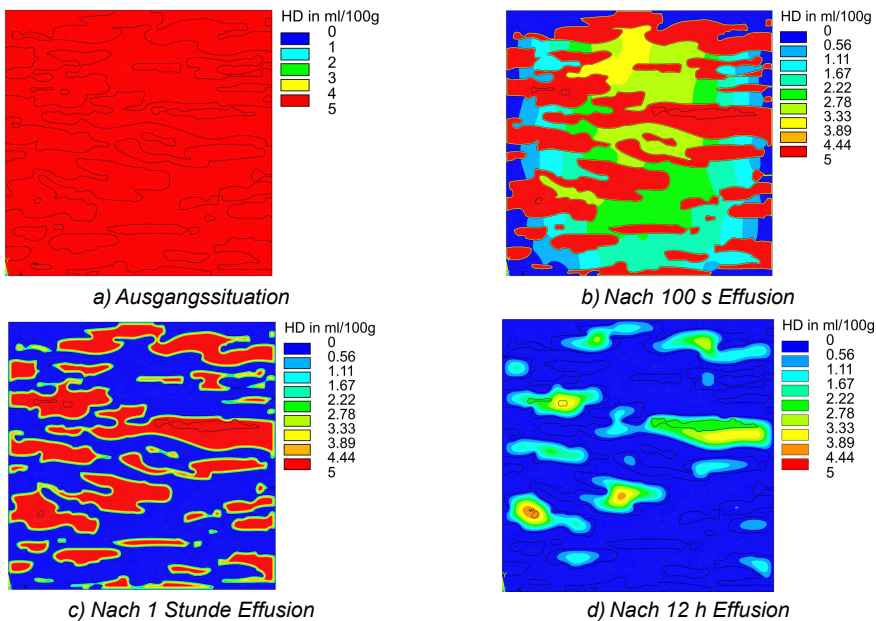
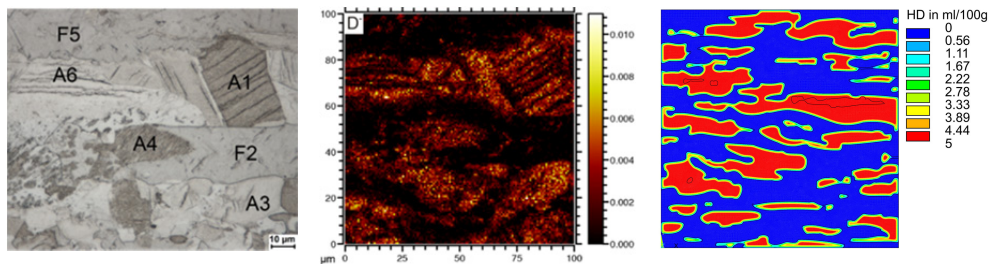


Abbildung 4.9: Simulierte Wasserstoffverteilung im Grundwerkstoff nach 100 s, einer Stunde und 12 Stunden Effusion

Bedingt durch die sehr langsame Diffusion im Austenit wird der Wasserstoff in Austenit häufig auch als reversibel getrappter Wasserstoff bezeichnet [107]. Nach einstündiger Effusion verbleibt nahezu kein Wasserstoff in der ferritischen Phase, jedoch hat sich die Wasserstoffkonzentration im Austenit kaum reduziert. Selbst nach zwölfstündiger Effusion zu allen Seiten sind noch sehr hohe Wasserstoffkonzentrationen von ca. 85 % der Ausgangskonzentration im Austenit vorhanden.

Ähnliche Ergebnisse wurden auch von Straub et al. [166] in Experimenten am Duplexstahl mit der Flugzeit-Sekundärionen-Massenspektrometrie (engl.: time-of-flight secondary ion mass spectrometry – ToF-SIMS) erzielt. Untersucht wurde ein mit Deuterium beladener Duplexstahl. In *Abbildung 4.10* ist zum Vergleich das Ergebnis des ToF-SIMS Experiments mit dem zugehörigen Gefügeausschnitt des Duplexstahls dargestellt. Dem gegenübergestellt ist die simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration nach einstündiger Effusion, da auch in den ToF-SIMS Experimenten eine Stunde bis zur Analyse vergangen ist. Die Untersuchung zeigte, dass hohe Mengen an Deuterium in der austenitischen Phase zu detektieren sind, hingegen in der ferritischen Phase kaum Deuterium zu finden ist. Dies ist auch in diesem Fall auf eine schnelle Diffusion und Effusion des Wasserstoffs bzw. Deuteriums in der ferritischen Phase zurückzuführen. In der austenitischen Phase hingegen ist das Deuterium reversibel getrappt und führt somit zu einer höheren Anzeige im ToF-SIMS Versuch.



a) Analysierter Gefügeausschnitt des Duplexstahls mit A=Austenit und F=δ-Ferrit

b) ToF-SIMS Aufnahme der Verteilung des Deuteriums im Duplexgefüge

c) Simulierte Wasserstoffverteilung nach einstündiger Effusion

Abbildung 4.10: Vergleich der experimentell [166] und numerisch ermittelten Verteilung von Deuterium bzw. Wasserstoff im Duplexgefüge

Dieser reversibel getrappte Wasserstoff kann aber durch höhere Temperaturen [122, 133] oder auch durch mechanische Beanspruchung des Gefüges [121, 145, 232] wieder freigesetzt werden. Dies kann dann auch verzögert zum Beispiel im späteren Betrieb geschehen. Es besteht die Möglichkeit, dass der Wasserstoff in kritische Bereiche mit hohen plastischen Verformungen in der ferritischen Phase diffundiert und dort zu einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung beiträgt. Zudem ist in Bereichen hoher plastischer Verformungen eine martensitische Umwandlung des Austenits möglich, was durch hohe Wasserstoffkonzentrationen begünstigt werden kann [21, 75, 159–163, 166, 184]. Dann liegt im Gefüge ein an Wasserstoff übersättigter Martensit vor, wie es zum Beispiel auch beim Schweißen vorkommt [12, 101–103]. In diesem Martensit kann sehr schnell ein Riss initiieren, da martensitische Gefüge sehr empfindlich gegenüber Wasserstoff reagieren [20, 21], bzw. trägt Martensit zum schnelleren Rissfortschritt durch die ehemals austenitische Phase bei. Auch ist der Literatur zu entnehmen, dass hohe Wasserstoffkonzentrationen die Versetzungstätigkeit anregen und somit zu einer leichteren Rissbildung im Austenit beitragen können [146, 147, 192].

In *Abbildung 4.10a* (Bereich A1) ist zu erkennen, dass in der austenitischen Phase parallele Risse vorhanden sind. Straub et al. [166] vermuten hohe Dehnungen im Gefüge, hervorgerufen durch Akkumulation von Wasserstoff im Austenit, als Ursache für eine Zwillingsbil-

dung entlang derer dann eine parallele Rissbildung auftritt. Diese parallele Rissbildung im Austenit konnte auch von Glowacka et al. [161] beobachtet werden, wobei die Autoren zudem eine martensitische Umwandlung in der austenitischen Phase feststellen. Die Gefügeveränderung erfolgt dabei allein durch die Beladung bzw. Diffusion von Wasserstoff im Gefüge, ohne zusätzliche Beanspruchung der Probe. Barnoush et al. [192] beobachten in ihren Versuchen die Bildung von Gleitlinien in der austenitischen Phase eines Duplexstahls während der Beladung mit Wasserstoff. Eine Rissbildung oder martensitische Umwandlung stellen sie aber nicht fest. Vermutlich sind die aufgenommenen Wasserstoffkonzentrationen zu gering für eine Rissbildung oder Gefügeumwandlung, wobei in der Arbeit keine Angaben zur vorliegenden Wasserstoffkonzentration gemacht werden. Jedoch zeigt auch dieses Phänomen die Wirkung von Wasserstoff auf das Verformungsverhalten von Duplexstählen.

Für austenitische Werkstoffe bzw. auch für die austenitische Phase in Duplexstählen ist bekannt, dass Wasserstoff die Stapelfehlerenergie herabsetzt. Dadurch ändert sich im Austenit der Verformungsmechanismus von Quergleiten bzw. gleichmäßigem Gleiten der Versetzungen in planares Gleiten, wodurch der Austenit an Duktilität verliert. Die Herabsetzung der Stapelfehlerenergie kann in hochlegierten Werkstoffen eine martensitische Umwandlung oder eine Zwillingsbildung begünstigen [19–21, 75, 77, 79, 145, 159, 162, 233]. Daher besteht die Möglichkeit, dass durch koplanares Gleiten auf bevorzugten Gitterebenen, und damit verbunden ein Duktilitätsabfall sowie eine martensitische Umwandlung bzw. Zwillingsbildung, eine wasserstoffunterstützte Rissbildung begünstigt wird.

Wird für die Effusion des Wasserstoffs zudem Trapping an der Phasengrenze angenommen, bleibt nahezu der gesamte Wasserstoff in Höhe der Ausgangskonzentration im Austenit vorhanden, *Abbildung 4.11*. Der Wasserstoff in der ferritischen Phase wird in beiden Fällen gleich schnell reduziert. Daher ist hier festzuhalten, dass im Fall der Effusion die Reduktion des Wasserstoffgehalts im Gefüge vom Transport des in der austenitischen Phase getrappten Wasserstoffs abhängt.

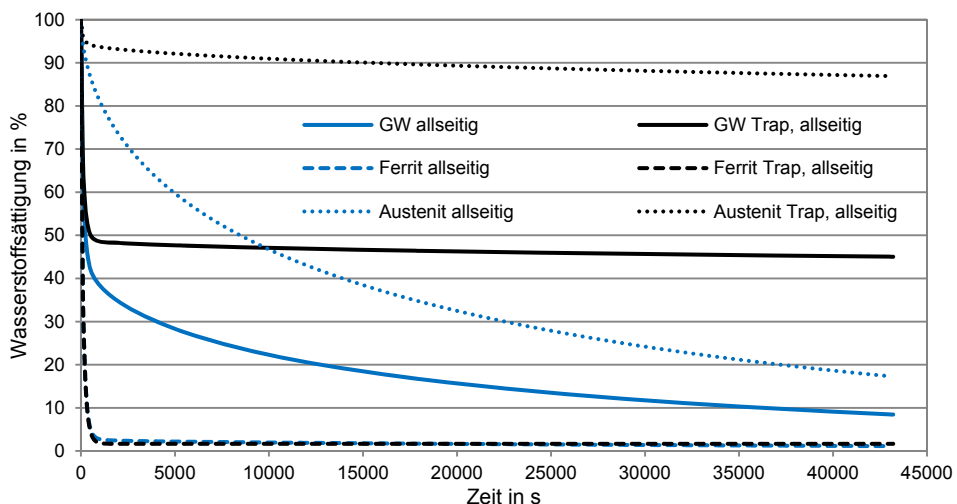
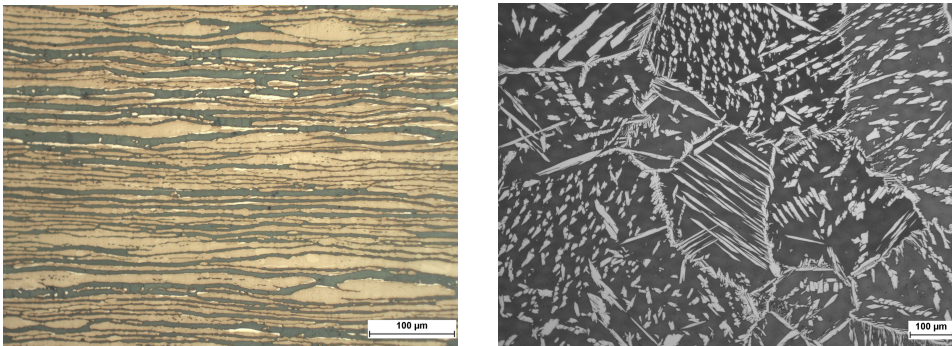


Abbildung 4.11: Vergleich der phasenspezifischen Wasserstoffdiffusion in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls für die Effusion mit und ohne Trapping an der Phasengrenze

Für die Effusion von Wasserstoff aus dem Duplexgefüge bleibt festzuhalten, dass der Wasserstoff sehr schnell aus der ferritischen Phase effundiert und hohe Mengen an Wasserstoff im Austenit zurückbleiben. Der Wasserstoff ist im Austenit getrappt und es wird mehr Zeit benötigt, um auch diesen Wasserstoff zu reduzieren. Unter Annahme von Trapping an der Phasengrenze effundiert nahezu kein Wasserstoff aus dem Austenit. Im Austenit beeinflusst Wasserstoff die Versetzungsbewegung, was zu einer Zwillingsbildung oder auch martensitischen Gefügeumwandlung beitragen und somit einen Riss begünstigen kann. Zudem besteht die Möglichkeit einer verzögerten Freisetzung des getrappten Wasserstoffs durch mechanische oder thermische Beanspruchung des Gefüges. Der freigesetzte Wasserstoff kann dann in den  $\delta$ -Ferrit diffundieren und dort zu einer wasserstoffunterstützten Schädigung beitragen.

### 4.1.2 Wasserstofftransport in Schweißnahtgefügen des Duplexstahls

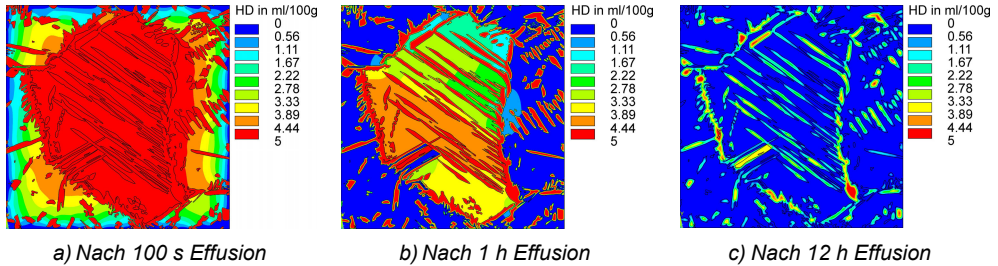
Neben der elektrochemischen Wasserstoffaufnahme im Grundwerkstoff besteht auch die Möglichkeit einer Wasserstoffeinbringung über den Schweißprozess. Das Schweißnahtgefüge unterscheidet sich zum Grundwerkstoff über die Phasenanteile sowie die Gefügemorphologie. Während im Grundwerkstoff, bedingt durch den Herstellungsprozess, eine von der Walzrichtung abhängige zeilige Anordnung der austenitischen und ferritischen Phase vorzufinden ist, hat das Schweißnahtgefüge eher eine gröbere und nicht stark orientierte Anordnung von Austenit und  $\delta$ -Ferrit, *Abbildung 4.12*. Auch die Schweißnaht erstarrt primär ferritisch und an den Korngrenzen scheidet sich Austenit aus. Mit zunehmender Abkühlung wachsen von diesem Korngrenzenaustenit nadelförmige Austenitinseln in die ferritischen Körner. Diese Gefügemorphologie wird auch als Widmanstätten-Struktur bezeichnet [60, 234–238].



*Abbildung 4.12: Mikroschliff des Grundwerkstoffs (links) und des Schweißguts (rechts)*

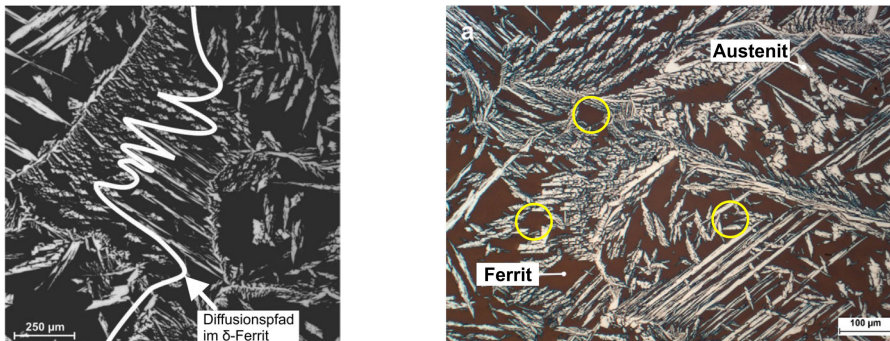
Mit der Gefügemorphologie ändert sich auch das Wasserstofftransportverhalten. Zur Ermittlung des Einflusses der Gefügemorphologie der Schweißnaht auf die Verteilung und das Transportverhalten von Wasserstoff wurden Simulationen mit einem Modell des Realgefüges und zwei vereinfachten Modellen durchgeführt. Es ist davon auszugehen, dass im Schweißnahtgefüge nach der schweißtechnischen Fertigung eine nahezu homogene Wasserstoffverteilung im Gefüge vorliegt, wenn Wasserstoff über den Schweißprozess in das Schmelzbad aufgenommen wird. Daher wurde im numerischen Modell nur eine allseitige Effusion simuliert und keine Beladung der Schweißnaht über elektrochemische Prozesse

betrachtet. Die numerischen Ergebnisse für die Effusion des Wasserstoffs aus dem Realgefüge der Schweißnaht bei anfänglich homogener Wasserstoffverteilung im Gefüge sind in **Abbildung 4.13** dargestellt.



**Abbildung 4.13:** Simulierte Wasserstoffverteilung im Schweißnahtgefüge nach a) 100 s, b) einer Stunde und c) 12 Stunden Effusion bei anfänglich homogener Wasserstoffverteilung

Ersichtlich ist, dass nach einstündiger Effusion innerhalb der vom Austenit umschlossenen ferritischen Phase noch sehr hohe Wasserstoffkonzentrationen vorliegen. Das umschlossene ferritische Gefüge ist entweder gänzlich vom Austenit umgeben bzw. nur über sehr kleine ferritische Stege mit dem umliegenden Gefüge verbunden. Daher entsteht hier ein Engpass für den Wasserstofftransport bzw. der Austenit wirkt als Diffusionssperre. Nach zwölfstündiger Effusion sind daher auch noch Wasserstoffkonzentrationen in Höhe der Ausgangskonzentration von  $HD_0 = 5 \text{ Nm}/100\text{g Fe}$  in der austenitischen Phase vorhanden. Gleichwohl die austenitische Phase im Vergleich zum Grundwerkstoff hier viel schmaler ist und somit die Diffusionswege innerhalb des Austenits kürzer sind, wird bedingt durch den sehr verwundenen Diffusionspfad im  $\delta$ -Ferrit (**Abbildung 4.14**) und dem Transport über Engpässe mehr Zeit für die Wasserstoffeffusion benötigt.

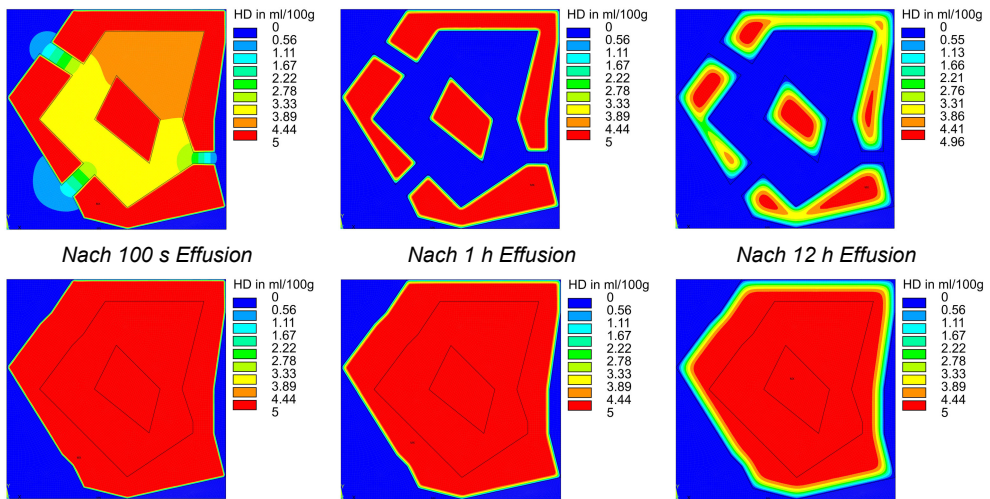


**Abbildung 4.14:** Schematische Darstellung des verwundenen Diffusionspfades im  $\delta$ -Ferrit (links) [114] und vom Austenit umschlossenen ferritische Gefügebereiche (rechts) [112]

Da das Modell des Realgefüges eine Dimensionen von  $420 \mu\text{m} \times 420 \mu\text{m}$  hat, wurden für den Vergleich des Diffusionsverhaltens von Schweißgut und Grundwerkstoff zwei Ersatzmodelle des Schweißnahtgefüges erstellt. Die Ersatzmodelle haben die gleichen Abmessungen wie das Modell des Realgefüges des Grundwerkstoffes ( $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ ). Hierbei wurde das Schweißnahtgefüge schematisch nachgestellt und zwei unterschiedliche Modelle generiert. Im ersten Modell wurde ein teilweise vom Austenit umschlossenes  $\delta$ -Ferritkorn

berücksichtigt. Das zweite Modell stellt einen gänzlich umschlossenen ferritischen Bereich dar. Beide Varianten der Modelle sind im Realgefüge einer Duplex-Schweißnaht auszumachen, *Abbildung 4.14*.

Für den Vergleich der Sättigung des Gefüges wurde im Fall der beiden vereinfachten Modelle versucht, ein ähnliches Phasenverhältnis wie im Grundwerkstoff einzustellen. Somit ist es auch möglich im Vergleich zum Grundwerkstoff den Einfluss der Anordnung und Form der Austenitischen Phase zu untersuchen. Die Simulierte Wasserstoffverteilung für die Effusion in den vereinfachten Modellen des Schweißguts ist in *Abbildung 4.15* gezeigt. Auch die einfachen Modelle des Schweißnahtgefüges ergeben ähnliche Verteilungen der Wasserstoffkonzentration wie das Modell des Realgefüges. Hier ergeben sich bedingt durch die Anordnung und Form der Phasenbestandteile Engpässe bzw. Diffusionssperren durch die austenitische Phase. Zu sehen ist auch, dass bei nahezu gleichen Phasenanteilen wie im Grundwerkstoff die Effusion des Wasserstoffs im Schweißnahtgefüge mehr Zeit benötigt, *Abbildung 4.16*. Es verbleiben bei gleicher Effusionszeit sogar größere Mengen Wasserstoff im Schweißnahtgefüge als im Grundwerkstoff. Dieses Verhalten zeigt, dass die Wasserstoffdiffusion neben der Orientierung der Phasen im Duplexgefüge auch deren Größe, Form und Anordnung einen erheblichen Einfluss auf den Wasserstofftransport hat.



*Abbildung 4.15: Simulierte Wasserstoffverteilung in einer Duplex-Schweißnaht nach 100 s, einer Stunde und 12 Stunden Effusion für einen verbundenen  $\delta$ -Ferrit und ein komplett vom Austenit umschlossenen  $\delta$ -Ferrit*

Neben diesen Effekten ist auch das Trapping an Ausscheidungen, wie zum Beispiel Chromnitriden, entscheidend [112, 115]. Chromnitride können während der schweißtechnischen Fertigung bevorzugt in der ferritischen Phase des Duplexstahls entstehen [27]. Daher wird neben dem getrappten Wasserstoff in der austenitischen Phase auch ein hoher Anteil an Wasserstoff im  $\delta$ -Ferrit an Ausscheidungen festgehalten und es ist mit erhöhten Wasserstoffgehalten bzw. geringeren Anteilen an diffusiblem Wasserstoff zu rechnen. In diesem Fall ist in einer Schweißnaht des Duplexstahls mit einer verzögerten Freisetzung des Wasserstoffs zu rechnen bzw. kann durch zusätzliche mechanische Beanspruchung des Gefüges sehr leicht ein Riss initiiert werden. Zudem ist es möglich, dass sich in Abhän-



gigkeit der Temperaturführung in der Schweißverbindung auch spröde intermetallische Phasen ausscheiden, welche eine Rissbildung begünstigen können.

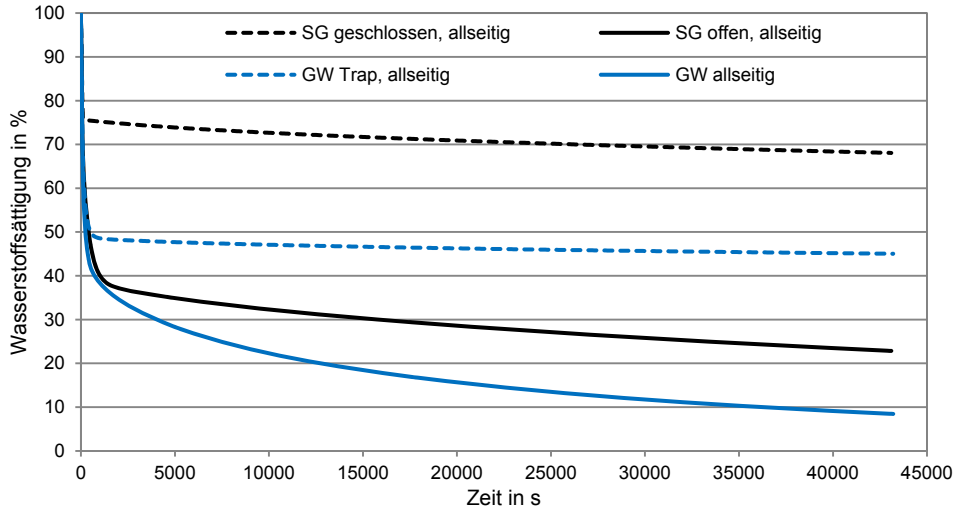


Abbildung 4.16: Verlauf Wasserstoffeffusion im Grundwerkstoff (GW) und Schweißgut (SG) bei anfänglich homogener Wasserstoffverteilung und allseitiger Effusion

In den Arbeiten von Brauser et al. [112, 114, 115] wurde das Diffusionsverhalten von Wasserstoff im Schweißnahtgefüge des Duplexstahls X2CrNiMoN 22-5-3 vergleichend zum Grundwerkstoff untersucht. Dabei sind zwei unterschiedliche Arten der Wasserstoffbeladung des entsprechenden Gefüges genutzt worden. Zum einen erfolgte die Beladung des Schweißguts über den Schweißprozess selbst durch Wasserstoff im Schutzgas und zum anderen über einen elektrochemischen Prozess. Zudem wurde auch der Grundwerkstoff unter gleichen Bedingungen elektrochemisch beladen. Die Ermittlung der jeweils vorliegenden Wasserstoffkonzentration erfolgte über die Trägergas-Heißextraktion (TGHE). Auch hier kann bestätigt werden, dass der Wasserstofftransport primär über die ferritische Phase des Duplexstahls erfolgt und stark von der vorliegenden Gefügemorphologie abhängig ist.

Im Vergleich des elektrochemisch beladenen Schweißguts und Grundwerkstoffes stellen die Autoren von [114, 115] fest, dass höhere Temperaturen in der TGHE keine höheren Wasserstoffkonzentrationen ergeben. Das deutet darauf hin, dass der Wasserstoff nur als diffusibler Wasserstoff in der ferritischen Phase des Schweißguts und des Grundwerkstoffes vorlag und kein Wasserstoff in die austenitische Phase diffundiert bzw. im Austenit oder an der Phasengrenze getrappt ist. Jedoch ist diese Wasserstoffverteilung auch der kurzen Beladungszeit von 30 Minuten geschuldet, die es nicht erlaubt, ausreichend Wasserstoff in die austenitische Phase des Duplexstahls zu transportieren. Andererseits wird für das Schweißnahtgefüge eine weitaus geringere Wasserstoffkonzentration gemessen als im Grundwerkstoff. Gleichwohl der identischen Beladeparameter wurde im Schweißgut weitaus weniger Wasserstoff aufgenommen. Die Ergebnisse lenken darauf hin, dass der verwendete Diffusionspfad bzw. geringere Diffusionsquerschnitt im  $\delta$ -Ferrit des Schweißguts, den Transport von Wasserstoff erschwert. Die Ergebnisse decken sich auch mit den nume-

rischen Ergebnissen dieser Arbeit. Unabhängig ob der Wasserstoff diffundiert oder effundiert, ist der Transport in der ferritischen Phase weitaus schneller als im Austenit (siehe *Abbildung 4.5* und *Abbildung 4.11*). Im Vergleich zum Grundwerkstoff kann der Wasserstoff im Grundwerkstoff bedingt durch die Gefügemorphologie schneller transportiert werden (*Abbildung 4.16*). Wird der Wasserstoff über den Schweißprozess in das Gefüge eingebracht [112, 114, 115], so wird ein großer Teil des Wasserstoffs in der austenitischen Phase, an der Phasengrenze und an Ausscheidungen reversibel getrappt. Die Einlagerung hoher Wasserstoffkonzentrationen im Austenit der Schweißnaht resultiert aus der Erstarrung des Gefüges [90]. Durch die Erstarrung liegt zunächst ein übersättigter  $\delta$ -Ferrit vor. Die Umwandlung in bzw. Ausscheidung des Austenits während der Abkühlung bedingt, dass ein Großteil des dort vorliegenden Wasserstoffs in die austenitische Phase übergeht. Der Wasserstoff wird während der Erstarrung regelrecht im Austenit bzw. im Gefüge eingefroren. Dadurch reduziert sich auch der diffusible Anteil des Wasserstoffs im Gefüge. Oga wa und Miura [90] beschreiben sogar eine Abhängigkeit des diffusiblen Wasserstoffs im Gefüge von den Gehalten an austenitstabilisierenden Elementen wie Nickel und Stickstoff. Ersichtlich wird der Anteil an getrapptem Wasserstoff durch zunehmende Wasserstoffgehalte bei höheren Analysetemperaturen in der TGHE.

Für das Transportverhalten von Wasserstoff in Schweißnahtgefügen des Duplexstahls bleibt festzuhalten, dass die Diffusion und Effusion ähnlich wie im Grundwerkstoff abläuft. Jedoch ergibt sich durch die Erstarrungsmorphologie des Gefüges in der Schweißnaht ein makroskopisch langsamer Wasserstofftransport. Bedingt durch die Anordnung und Form der austenitischen Phase (Widmanstätten-Struktur) ergeben sich für die ferritische Phase weitaus verwundener Diffusionspfade bzw. geringere Diffusionsquerschnitte im  $\delta$ -Ferrit im Vergleich zum Grundwerkstoff. Zudem wirkt der Austenit durch die nahezu vollständige Umschließung der ferritischen Körner als zusätzliche Diffusionsbarriere. Resultierend aus der schnellen Erstarrung des Gefüges bei der schweißtechnischen Verarbeitung dieser Stähle wird der möglicherweise über den Schweißprozess eingebrachte Wasserstoff in der austenitischen Phase als auch in der ferritischen Phase, z.B. an Chromnitriden, getrappt. Daher muss hier mit erhöhten Wasserstoffkonzentrationen im Gefüge gerechnet werden, die durch mechanische oder thermische Beanspruchung des Werkstoffes aber auch wieder freigesetzt werden können. Im Fall der Effusion von Wasserstoff aus dem Schweißnahtgefüge ergeben sich daher hohe verbleibende Wasserstoffkonzentrationen bzw. längere Zeiten für die Reduktion der Wasserstoffkonzentration. Durch die sperrende Wirkung des Austenits wird auch der Wasserstofftransport in der ferritischen Phase behindert und es wird auch hier mehr Zeit für die Wasserstoffreduktion bzw. -effusion benötigt. Daher ist für das Schweißgut des Duplexstahls mit einer höheren Wahrscheinlichkeit für die wasserstoffunterstützte Rissbildung zu rechnen, wenn große Mengen an Wasserstoff über den Schweißprozess in den Werkstoff eingebracht werden.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass aufgrund des Wasserstofftransportverhaltens eine wasserstoffunterstützte Rissbildung in der ferritischen Phase am wahrscheinlichsten ist, da diese schnell gesättigt wird und zudem empfindlicher auf Wasserstoff reagiert sowie ein geringeres Verformungsvermögen als die austenitische Phase hat. Dadurch wird die ertragbare Beanspruchung der ferritischen Phase durch Wasserstoff schnell herabgesetzt und eine geringe zusätzliche Beanspruchung führt zu einer Schädigung. Sind auch hohe Wasserstoffkonzentrationen in der austenitischen Phase des Duplexstahls vorhanden, so

wird die Versetzungsbewegung beeinflusst und eine mögliche Zwillingsbildung oder martensitische Gefügeumwandlung kann somit einen schnelleren Rissfortschritt begünstigen. Dabei ist es möglich, dass eine Rissbildung auch ohne eine zusätzliche äußere mechanische Beanspruchung erfolgt. Zudem kann die Gefügeumwandlung durch die plastische Verformung vor der Risspitze der im Austenit gestoppten Risse begünstigt werden.

## 4.2 Spannungen und Dehnungen im Duplexstahl

Die Verteilung und Höhe der Spannungen und vor allem der Dehnungen in den Phasen des Duplexstahls ist für die Rissentstehung neben der Wasserstoffverteilung von entscheidender Bedeutung. Das Zusammenspiel der vorliegenden Gefüge und den im Gefüge vorhandenen Wasserstoffkonzentrationen entscheidet über die Höhe der Beanspruchbarkeit des Gefüges und somit über die Rissinitiierung und den Rissfortschritt. Daher soll im Nachfolgenden auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten des Duplexstahls näher eingegangen werden. Bevor die Spannungen und Dehnungen in den Phasen des Duplexstahls beschrieben werden, sollen zunächst die Randbedingungen und Werkstoffparameter mit den vorhandenen numerischen Modellen überprüft und verifiziert werden.

### 4.2.1 Vergleich der Randbedingungen und Werkstoffparameter

Für die Überprüfung der Randbedingungen zur korrekten Abbildung des realen Spannungs-Dehnungs-Verhaltens des Duplexstahls wurden zunächst die sich ergebenden technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven der zweidimensionalen Zugprobe (2D) mit denen der dreidimensionalen Zugprobe (3D) sowie denen der realen Zugversuche (BAM 3 und BAM 4) gegenübergestellt. Dazu wurden die Verschiebungen zweier Knoten im Messbereich der zweidimensionalen Zugprobe mit einem Anfangsabstand von 30 mm sowie die globale Reaktionskraft für jeden Zeitschritt aufgezeichnet. Die Berechnung der technischen Spannungs-Dehnungs-Kurve erfolgte über die Berücksichtigung des Querschnitts der Zugprobe im Messbereich und den Abstand der beiden Knoten im unverformten Zustand. Für die Simulation wurde eine Verschiebung von 13,5 mm auf die Probe aufgeprägt, welche der Verlängerung der Probe des realen Zugversuches beim Bruch entspricht. Überprüft wurden mit der zweidimensionalen Zugprobe die Randbedingungen ebener Spannungszustand (ESZ), ebener Dehnungszustand (EDZ), generalisierter ebener Dehnungszustand (gEDZ) und Axialsymmetrie (Axi). Die Ergebnisse der numerischen Simulationen sind in *Abbildung 4.17* grafisch dargestellt.

Auch für das Modell des Realgefüges (Meso) wurden die Randbedingungen EDZ, ESZ und Axi überprüft. Im Modell wurde für die Simulation eine Verschiebung von rund 20 % längs der Gefügeorientierung aufgeprägt. Diese Dehnung entspricht der makroskopischen Dehnung bei Zugfestigkeit. Für die Auswertung wurde die globale Verschiebung eines Randknotens im Modell des Realgefüges sowie die resultierende globale Reaktionskraft ausgewertet und die globale technische Spannungs-Dehnungs-Kurve berechnet. Die entsprechenden globalen technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven des Modells des Realgefüges sind in *Abbildung 4.18* dargestellt.

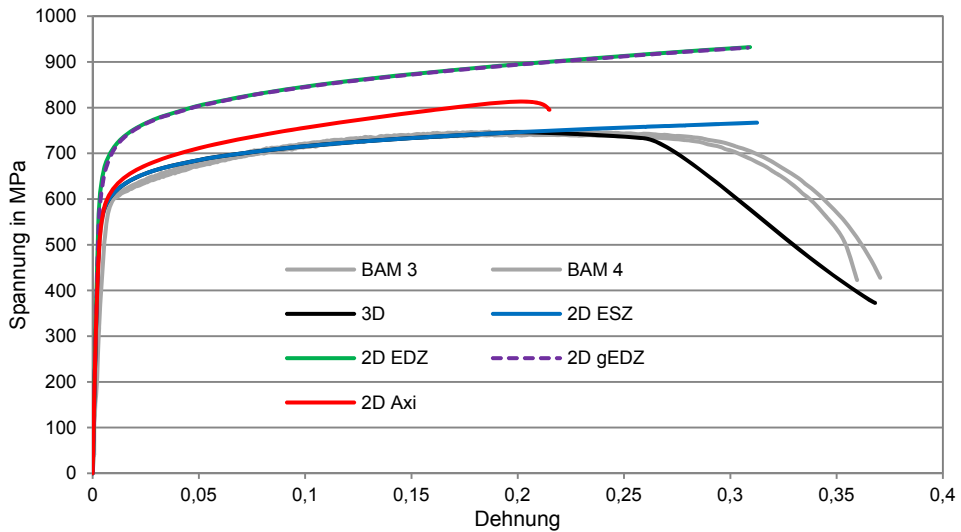


Abbildung 4.17: Vergleich der simulierten Fließkurven mit den experimentell ermittelten Fließkurven unter Nutzung verschiedener Randbedingungen für das 3D und 2D Modell der Zugprobe

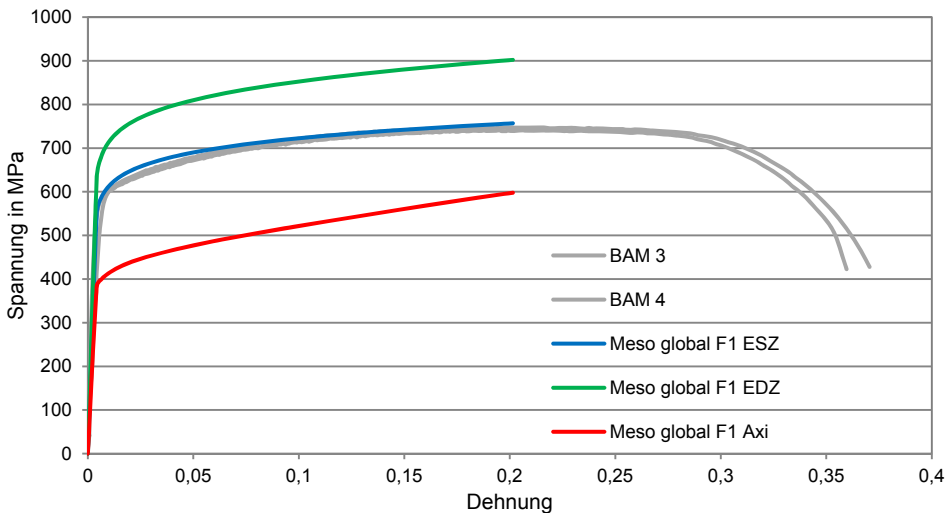


Abbildung 4.18: Vergleich der simulierten Fließkurven mit den experimentell ermittelten Fließkurven unter Nutzung verschiedener Randbedingungen für das Modell des Realgefüges

Im Vergleich der Kurven in *Abbildung 4.17* ist zu sehen, dass die simulierten Kurven des dreidimensionalen Modells und die des zweidimensionalen Modells mit der Randbedingung ebener Spannungszustand (ESZ) sehr gut mit den gemessenen Kurven (BAM 3 und BAM 4) übereinstimmen. Im Vergleich der 3D und 2D ESZ Simulation ist die sehr gute Deckung beider Kurven bis zur Zugfestigkeit des Duplexstahls bei ca. 20 % Dehnung zu erkennen. Nach Beginn der Einschnürung differieren die Kurven des dreidimensionalen und des zweidimensionalen Modells aufgrund der unterschiedlichen vorgegebenen wahren

Spannungs-Dehnungs-Kurven. Hier wurde versucht die Einschnürung im Fall der dreidimensionalen Simulation realitätsnah abzubilden.

Bei der Verwendung des ebenen Dehnungszustandes (EDZ und gEDZ) fallen die Spannungen im Modell höher aus im Vergleich zum realen Zugversuch. Im Fall der axialsymmetrischen Randbedingung ist eine bessere Übereinstimmung zu erkennen. Der Abfall der Kurve nach ca. 20 % Dehnung ist durch eine Einschnürung im numerischen Modell bedingt. Jedoch ist die Rechnung aufgrund von Konvergenzproblemen vor dem Erreichen der finalen Verschiebung im Modell abgebrochen. Aus diesem Vergleich geht hervor, dass für die zweidimensionale Simulation der Spannungen und Dehnungen der ebene Spannungszustand am geeignetsten erscheint, zumal die Abmessungen der Zugprobe in Dickenrichtung im Vergleich zur Länge sehr klein sind. Auch für das Modell des Realgefüges ist die beste Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Fließkurven unter Nutzung der Randbedingung des ebenen Spannungszustandes (ESZ) zu finden, *Abbildung 4.18*. Im Fall des ebenen Dehnungszustandes (EDZ) werden die Spannungen überschätzt und für die Axialsymmetrie (Axi) unterschätzt.

Neben den Randbedingungen sind auch die vorgegebenen Werkstoffeigenschaften global für den Duplexstahl als auch auf der Mesoebene für die Phasen des Duplexstahls zu überprüfen. Dabei stand zunächst die korrekte Abbildung der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurve bei Nutzung der phasenspezifischen Werkstoffeigenschaften im Vordergrund. Dazu sind mit den in *Kapitel 3.2.3* vorgestellten Werkstoffeigenschaften der beiden Fälle Simulationen mit dem dreidimensionalen (3D) und zweidimensionalen (2D) Modell der Zugprobe sowie mit dem Modell des Realgefüges des Grundwerkstoffes (Meso) durchgeführt worden. Für die 3D und 2D Simulation des Zugversuches wurde die jeweilige wahre Spannungs-Dehnungs-Kurve des Duplexstahls als Eingabe genutzt, wobei für die 3D Simulation die identische Kurve wie für die 2D Simulation verwendet wurde. Daher tritt für diese Simulationen im 3D Modell keine Einschnürung auf und die Spannungs-Dehnungs-Kurve zeigt keinen Abfall der Spannung nach Erreichen der Zugfestigkeit wie in *Abbildung 4.17*.

Im Fall des Modells des Realgefüges kamen die entsprechenden Kurven der austenitischen und ferritischen Phase zur Anwendung. Für den Vergleich der resultierenden globalen technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven wurde das Modell des Realgefüges wie eine Zugprobe behandelt. Die globale Verschiebung zweier Eckknoten sowie die resultierende globale Kraft wurden für jeden Zeitschritt aufgezeichnet und wie zuvor beschrieben ausgewertet. Um den Einfluss der Gefügeorientierung auf das Spannungs-Dehnungs-Verhalten zu untersuchen, wurde zudem jeweils ein Zugversuch längs und quer zur Gefügeorientierung für beide dargestellten Fälle simuliert. Die entsprechenden globalen technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für beide Fälle des phasenspezifischen Verhaltens sind in *Abbildung 4.19* und *Abbildung 4.20* gezeigt. Für alle zweidimensionalen Simulationen wurde der ebene Spannungszustand (ESZ) verwendet. Für das Modell des Realgefüges wurden die in *Kapitel 3.2.3* dargestellten Randbedingungen genutzt.

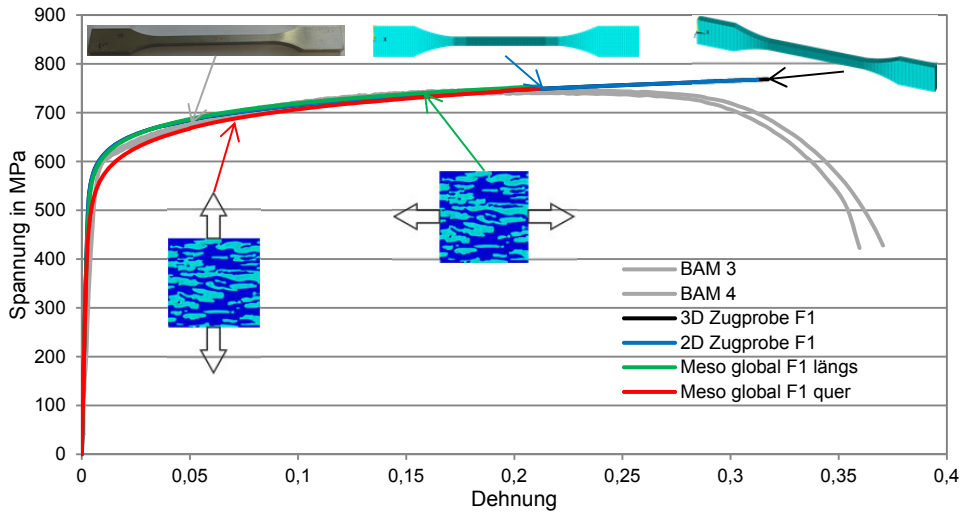


Abbildung 4.19: Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für den Fall 1 (F1)

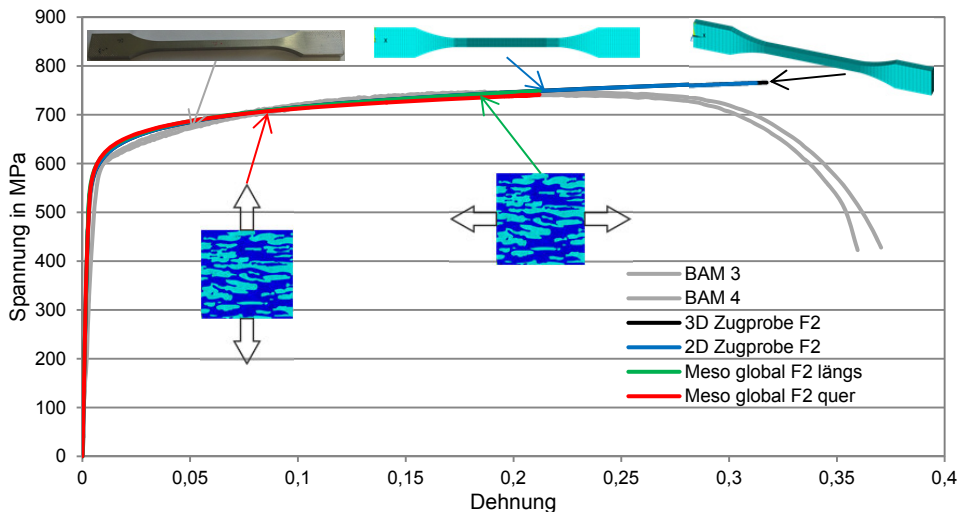


Abbildung 4.20: Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für den Fall 2 (F2)

Zu sehen ist die gute Übereinstimmung der simulierten und experimentell ermittelten makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für beide Fälle. Daher ist hier davon auszugehen, dass auch die phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen im Modell des Realgefüges mit dem ebenen Spannungszustand (ESZ) korrekt abgebildet werden. Deshalb wird für die weiteren Simulationen im zweidimensionalen Raum der ebene Spannungszustand angenommen. Bei Betrachtung der Spannungs-Dehnungs-Kurve für das quer zur Gefügeorientierung gezogene Modell des Realgefüges (Abbildung 4.19, rote Kurve) ist im ersten Fall zu erkennen, dass die plastische Verformung des Werkstoffes früher

einsetzt. Dies ist bedingt durch die Orientierung des Gefüges. Im Fall der Belastung längs der Orientierung des Gefüges wird die Last von der ferritischen Phase getragen, welche mehr oder weniger gerade bzw. direkte Verbindungen von der rechten Seite zur linken Seite des Modells hat. Die ferritische Phase hat eine höhere Dehngrenze. Im Fall der Belastung quer zur Gefügeorientierung sind die Pfade durch austenitische Inseln unterbrochen. Daher wird hier die austenitische Phase stärker belastet. Die schmalen ferritischen Stege werden in diesem Fall einer Biegung unterzogen, was eine leichtere Verformung dieser Bereiche ermöglicht. Daher ist ein früheres Fließen des Werkstoffes auch makroskopisch sichtbar. Jedoch gleichen sich die Kurven mit zunehmender Belastung, d.h., auch die ferritische Phase wird plastisch verformt, wieder an.

Die Abhängigkeit der mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls von der Orientierung des Gefüges sowie der Textur der Phasen ist bekannt und wurde von einigen Autoren [35–41] bereits experimentell nachgewiesen. Für die Belastung quer zur Walzrichtung werden dabei die höchsten Festigkeitswerte aber auch geringsten Duktilitätswerte festgestellt. Dies entspricht der simulierten Belastung längs der Gefügeorientierung. Der simulierte Fall der Belastung quer zur Orientierung des Gefüges entspräche in der Realität einer Belastung normal zur Walzrichtung und würde real eher selten auftreten. Dennoch ist die Abhängigkeit auch hier zu erkennen.

Im Vergleich der beiden angenommenen Fälle für das phasenspezifische mechanische Verhalten ist ersichtlich, dass im zweiten Fall die Belastung quer zur Orientierung des Gefüges zu keinem makroskopisch sichtbaren früheren Fließen des Werkstoffes führt. In diesem Fall liegen die beiden Dehngrenzen der Phasen näher zusammen und die der austenitischen Phase näher am makroskopischen Verhalten des Duplexstahls. Daher fängt kurz nach dem Einsetzen der plastischen Verformung im Austenit auch die ferritische Phase an zu fließen und der Effekt des makroskopisch früheren Fließens geht verloren. Aus diesen Ergebnissen lässt sich vermuten, dass die anisotropen Werkstoffeigenschaften makroskopisch nur dann sichtbar werden, wenn die Dehngrenzen der austenitischen und ferritischen Phase stark voneinander differieren und auch deutlich von der makroskopischen Dehngrenze des Duplexstahls abweichen. Jedoch spielt auch die Verfestigung der einzelnen Phasen des Duplexstahls eine wichtige Rolle. Mit Beginn der plastischen Verformung in einer der beiden Phasen wird die Beanspruchung in der anderen Phase kurzzeitig erhöht, bis auch diese anfängt sich plastisch zu verformen [57, 58, 67, 68]. Mit zunehmend stärkerer Verfestigung der zuerst fließenden Phase des Duplexstahls, wie für den zweiten simulierten Fall in der austenitischen Phase angenommen, wird auch die Beanspruchung in der noch nicht plastisch verformten Phase des Werkstoffes erhöht. Dadurch werden in dieser Phase schneller hohe Spannungen und Dehnungen erreicht und ein früheres Fließen der vermeintlich festeren Phase ist möglich. Zudem nähern sich beide Kurven bis zur Überschneidung dem makroskopischen Verhalten an. Das heißt, durch die zunehmende Verfestigung im Austenit wird hier eine zunehmend höhere Kraft für die Verformung des Austenits benötigt und gleichzeitig eine höhere Last auf die ferritische Phase übertragen, was sich insgesamt in einer höheren makroskopischen Beanspruchung äußert. Daher ist eine präzise Aussage zum Einfluss des phasenspezifischen Verhaltens auf die makroskopischen mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls nur über eine Reihe von Versuchen und numerischen Simulationen mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften der Duplexphasen möglich und bleibt zukünftigen Arbeiten vorbehalten. Zudem ist der Literatur auch

zu entnehmen, dass die Eigenschaften innerhalb der Phasen eines Duplexstahls in Abhängigkeit von der Legierungszusammensetzung, der Wärmebehandlung und auch Kristallorientierung sowie Korngröße stark variieren können (siehe *Kapitel 2.1.1* und *Kapitel 2.2*).

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass die makroskopischen Spannungen und Dehnungen über die Annahme eines ebenen Spannungszustandes (ESZ) in den numerischen Simulationen sehr gut abgebildet werden. Die Orientierung des Gefüges beeinflusst das makroskopisch messbare Spannungs-Dehnungs-Verhalten. Jedoch ist dieser Einfluss abhängig von den mechanischen Eigenschaften der austenitischen und ferritischen Phase des Duplexstahls sowie deren Beschaffenheit und Orientierung im Duplexgefüge. Des Weiteren ist festzuhalten, dass trotz des sehr unterschiedlichen mechanischen Verhaltens der Phasen sehr ähnliche makroskopische Spannungs-Dehnungs-Kurven zu verzeichnen sind. Das zeigt, dass über die Analyse des makroskopischen Verhaltens des Duplexstahls keinerlei Aussagen zum Verhalten der einzelnen Phasen getroffen werden können. Hier ist immer eine phasenspezifische Analyse, z.B. mit Beugungsexperimenten, notwendig, um die mechanischen Eigenschaften der austenitischen und ferritischen Phase zu charakterisieren.

### 4.2.2 Phasenspezifisches mechanisches Verhalten des Duplexstahls

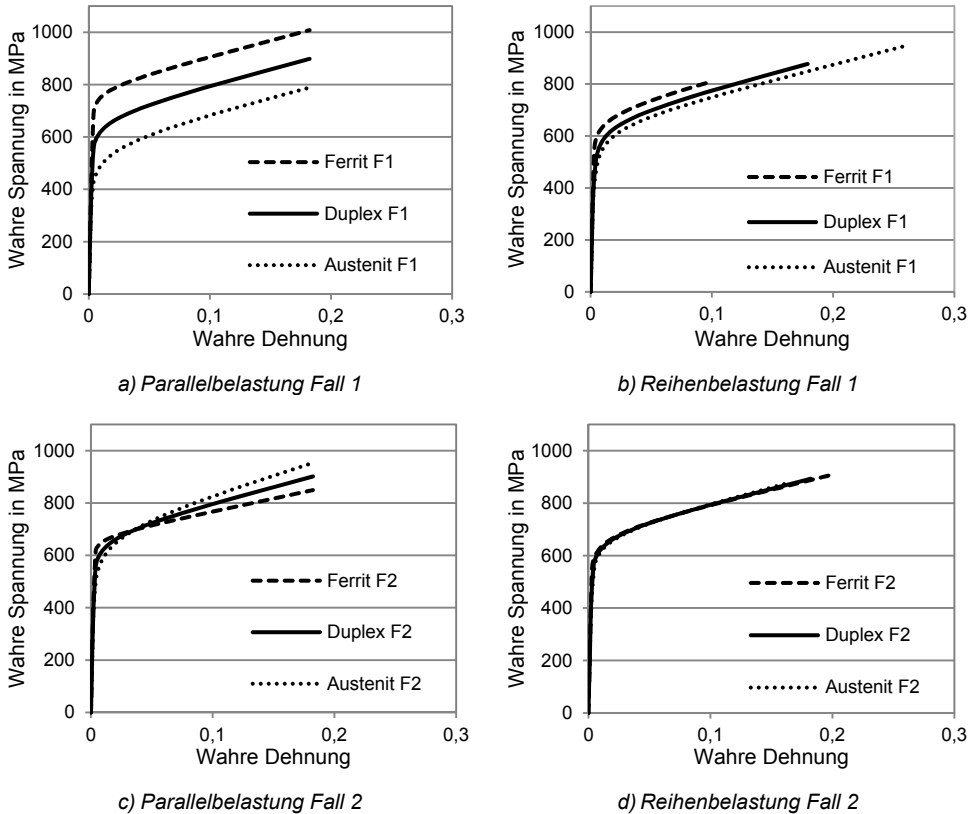
Wie bereits im vorherigen Kapitel gezeigt, lassen sich mit sehr unterschiedlichen phasenspezifischen mechanischen Eigenschaften gleiche makroskopische Spannungs-Dehnungs-Verhalten erzeugen. Daher ist die Analyse der einzelnen Phasen und deren Eigenschaften für eine Beurteilung eines Duplexwerkstoffes hinsichtlich der Gefahr einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung unabdingbar, um präzise Aussagen treffen zu können. Experimentell sind solche Analysen nur bedingt oder nur mit sehr hohem Aufwand realisierbar. Hier bietet die Finite-Elemente-Methode geeignete Herangehensweisen zur Ermittlung des phasenspezifischen Verhaltens und dessen Einfluss auf die makroskopischen Eigenschaften eines Werkstoffes. Deshalb soll im Folgenden näher auf die phasenspezifische Analyse des mechanischen Verhaltens eingegangen werden.

#### 4.2.2.1 Phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Analyse im einfachen Modell

Zunächst wird anhand eines simplen numerischen Modells das phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Verhalten an zwei idealen Beispielen erläutert sowie die Anwendbarkeit der Mischungsregel von Tamura et al. [50] gezeigt. Dazu wurde zunächst ein einfaches numerisches Modell mit einem Phasenverhältnis von 50 % Austenit zu 50 %  $\delta$ -Ferrit verwendet. Die Anordnung der beiden Phasen erfolgte in Anlehnung an das Modell von Fischmeister und Karlsson (*Abbildung 2.5*, links) für eine Reihen- bzw. Parallelbelastung des Duplexgefüges. Simuliert wurde mit den Randbedingungen und den beiden Fällen des unterschiedlichen mechanischen Verhaltens der Phasen, wie sie in *Kapitel 3.2.3* dargestellt sind. Für alle Simulationen wurde eine Verschiebung von 20 % auf das Mesomodell aufgeprägt. Diese Verschiebung entspricht einer wahren Dehnung von ca. 18 % im Modell. Ausgewertet wurden die wahren Dehnungen und die wahren Spannungen. Die Berechnung der makroskopischen wahren Spannungs-Dehnungs-Kurve (Duplex) erfolgte über die Mischungsregel von Tamura et al. [50] unter Berücksichtigung der Phasenanteile. Da die Mischungsregel nur für die Mittelwerte der einzelnen Komponenten der Spannungen und



Dehnungen in den Phasen exakte Ergebnisse liefert [68], wurden entsprechend nur die jeweiligen Komponenten in Richtung der aufgetragenen Belastung ausgewertet. Die sich ergebenden wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der einzelnen Phasen (Austenit und  $\delta$ -Ferrit) und die berechneten makroskopischen Kurven (Duplex) sind für beide Fälle sowie für Reihen- bzw. Parallelbelastung in *Abbildung 4.21* dargestellt.

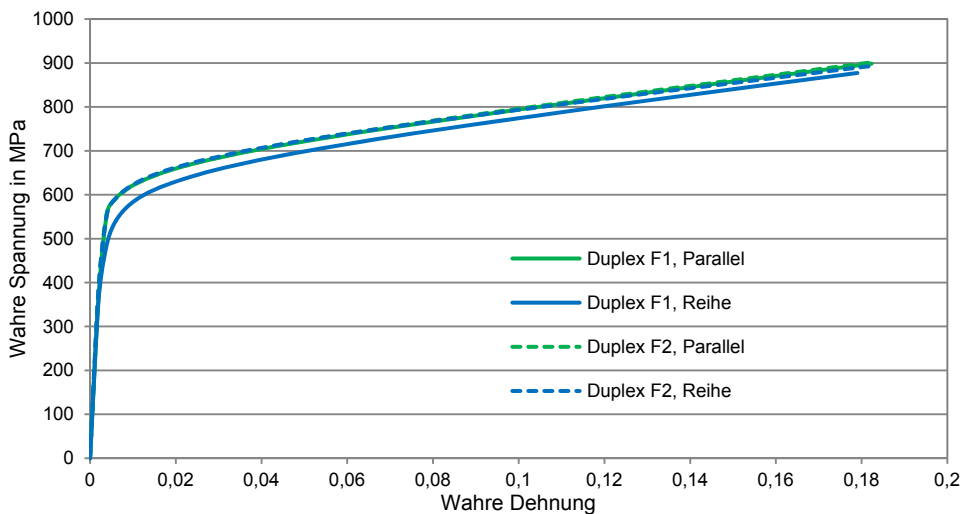


*Abbildung 4.21: Vergleich der wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen sowie des berechneten makroskopischen Verhaltens bei Reihen- und Parallelbelastung für beide Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens*

Die Kurven zeigen in beiden Fällen für die Parallelbelastung eine gute Übereinstimmung mit der Darstellung in *Abbildung 2.5* (linkes Bild). Beide Phasen erfahren die gleiche Dehnung und das makroskopische Verhalten ergibt sich aus den Spannungen der einzelnen Phasen bei gleicher Dehnung (Isodehnung) und den entsprechenden Volumenanteilen der Phasen.

Im Fall der Reihenbelastung wird deutlich, dass die Kurven der Phasenspannungen in Längsrichtung deutlich näher am makroskopischen Verhalten des Duplexstahls liegen. Wird im Fall der Reihenbelastung das makroskopische Verhalten bei gleicher Spannung (Isospannung) berechnet, so ergibt sich zwangsweise eine etwas geringere makroskopische Spannung als bei der Parallelbelastung. Dieses Verhalten ist auch für die beiden Grenzfälle der Belastung (Reihe und Parallel) in der Arbeit von Fischmeister und Karlsson [68] be-

schrieben. Jedoch kann dieses Verhalten nur für den ersten Fall (keine Überschneidung der Fließkurven der Phasen, F1) beobachtet werden, *Abbildung 4.22*. Für den zweiten Fall (F2) des mechanischen Verhaltens der Phasen geht dieser Effekt verloren. Dies liegt wahrscheinlich an der geringeren Differenz der Dehngrenzen sowie der Überschneidung der Kurven und dem damit verbundenen Wechsel zwischen weicher und fester Phase, wie bereits im *Kapitel 4.2.1* beschrieben. Eine prinzipielle Aussage hierzu ist jedoch nicht möglich, da in den Arbeiten [68] als auch [67] keine Überschneidung der phasenspezifischen Spannungs-Dehnungs-Kurven betrachtet wurde und daher auch kein Modell für einen Vergleich vorhanden ist. In der jüngeren Literatur werden solche einfachen Betrachtungen von Grenzfällen nicht durchgeführt bzw. wird immer das Verhalten des Realgefüges analysiert.



*Abbildung 4.22: Vergleich der berechneten makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven beider Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens für Reihen- und Parallelbelastung des zweiphasigen Gefüges*

In der Arbeit von Fischmeister und Karlsson [68] sowie Cho und Gurland [67] wurde die Mischungsregel von Tamura et al. [50] bereits erfolgreich auf reale zweiphasige Gefüge angewendet. In Realgefügen ergeben sich für die Berechnung der makroskopischen Spannungen und Dehnungen Verbindungslinien zwischen den Kurven der Phasen (siehe *Abbildung 2.5* rechts), welche mit zunehmender makroskopischer Beanspruchung flacher werden. Fischmeister und Karlsson [68] erklären dies mit der immer stärkeren und bevorzugten Dehnung der weicheren Phase des Werkstoffes. Abhängig ist der Anstieg der Verbindungslinien vom Verhältnis der Dehnung sowie den Spannungs-Dehnungs-Kurven der beiden Phasen. Cho und Gurland [67] bemerken dazu, dass die Festigkeit der härteren Phase einen entscheidenden Beitrag zur Gesamtfestigkeit leistet. In Abhängigkeit vom Verhältnis der Fließgrenzen der Phasen bzw. je größer der Unterschied der Fließgrenzen der Phasen ist, desto größer ist die Last, die von der festeren der beiden Phasen getragen wird. Für einen auf kugligen Zementit geblühten Stahl mit rund 17 % Zementit trägt diese Phase ca. 24 % der Last. Im Fall des Duplexstahls, also kleinerem Verhältnis der Fließgrenzen, ist die Lastverteilung der Phasen ähnlich der Volumenanteile dieser im Gefüge.

Hier trägt die ferritische Phase, welche 60 % des Gefüges ausmacht, rund 64 % der Gesamtlast, erklären die Autoren [67].

Unter Berücksichtigung der Betrachtungen beider Autorentams [67, 68] ist zu bemerken, dass für die numerische Simulation der erste Fall der Spannungs-Dehnungs-Kurven (keine Überschneidung der Fließkurven der Phasen) zunächst sinnvoller erscheint. Nur in diesem Fall werden bei Reihenbelastung in der austenitischen Phase des Duplexstahls höhere Dehnungen als in der ferritischen Phase erreicht, wie der *Abbildung 4.21b* zu entnehmen ist. Jedoch ist die Beanspruchung der festeren ferritischen Phase in diesem Fall geringer. Für den zweiten simulierten Fall des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens ist die erreichte Dehnung als auch die Spannung am Ende der Belastung des Modells in der ferritischen Phase weitaus höher als in der austenitischen Phase, *Abbildung 4.23*. Wie bereits im *Kapitel 2.2* erläutert, wird die austenitische Phase immer mit einer größeren (plastischen) Verformung assoziiert, was auch in Experimenten bestätigt wird. Daher erscheint der erste Fall des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens als sinnvoller. Jedoch stellen die hier gewählten Beispiele Grenzfälle der Beanspruchung eines zweiphasigen Gefüges dar. In einem Realgefüge wird immer eine Mischung dieser beiden Grenzfälle auftreten, solange keine stark gerichtete Anordnung sowie scharfe Abgrenzung der Phasen im Gefüge vorliegt. In diesem Zusammenhang bleibt zu überprüfen, wie sich die Spannungen und Dehnungen im Modell des Realgefüges verhalten. Generell wird in der Literatur aber immer eine Abhängigkeit der mechanischen Kennwerte von der Walzrichtung und somit von der Orientierung der austenitischen und ferritischen Phase festgestellt, *Kapitel 2.1.1* und *Kapitel 2.2*. Diese Feststellungen deuten zudem darauf hin, dass die angenommenen phasenspezifischen Eigenschaften des ersten Falls das reale Verhalten im Duplexstahl besser abbilden.

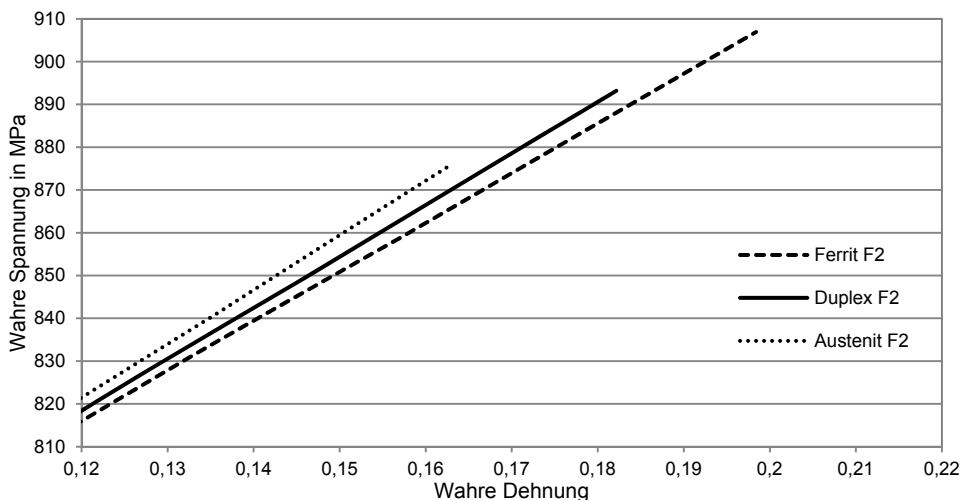


Abbildung 4.23: Detail der wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen sowie des berechneten makroskopischen Verhaltens bei Reihenbelastung für Fall 2 (Detail aus *Abbildung 4.21d*)

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass sich mit unterschiedlichen mechanischen Eigenschaften der Phasen des Duplexstahls gleiche makroskopische Spannungs-Dehnungs-Kurven erzeugen lassen. Deshalb ist ein Rückschluss vom makroskopischen Verhalten des Werkstoffes auf das phasenspezifische Verhalten nicht möglich. Für genaue Aussagen bezüglich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung ist daher immer das phasenspezifische Verhalten zu analysieren. Unter Nutzung eines einfachen und abgesicherten Modells kann die Gültigkeit der Mischungsregel nach Tamura et al. [50] zur Berechnung der makroskopischen Spannungen und Dehnungen aus dem phasenspezifischen Spannungs-Dehnungs-Verhalten bestätigt werden. Daher wird die Mischungsregel auch für die weitere Berechnung des makroskopischen Verhaltens des Duplexstahls für das Modell des Realgefüges verwendet.

### 4.2.2.2 Phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Analyse im Modell des Realgefüges

Die zuvor betrachteten numerischen Simulationen stellen zwei Grenzfälle der Beanspruchung eines zweiphasigen Gefüges dar. In der Realität tritt in einem Duplexgefüge keine reine Parallel- oder Reihenbelastung auf, sondern immer eine Mischung aus beiden Grenzfällen. Daher soll in diesem Abschnitt kurz auf die phasenspezifische Spannungs-Dehnungs-Analyse im Modell des Realgefüges eingegangen werden. Für die Ermittlung der phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen wurde im Modell des Duplexgefüges eine Verschiebung von 20 % der Ausgangslänge (0,1 mm) längs der Gefügeorientierung aufgeprägt. Ausgewertet wurden die Spannungen und Dehnungen in Belastungsrichtung (x-Richtung) als auch die Vergleichsdehnungen und Vergleichsspannungen nach von Mises in der austenitischen (Austenit) und ferritischen Phase (Ferrit). Über die Mischungsregel von Tamura et al. [50] und den Volumenanteilen der Phasen (siehe *Tabelle 3.2*) wurden die entsprechenden makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven des Duplexstahls (Duplex und Duplex Mises) berechnet. Die resultierenden Werte der Phasen aus dem numerischen Modell entsprechen den wahren Spannungen bzw. wahren Dehnungen. Daher wurde die globale technische Spannungs-Dehnungs-Kurve des Mesomodells (Meso global) mit Hilfe von *Gleichung (3.3)* und *Gleichung (3.4)* in die wahre Spannungs-Dehnungs-Kurve umgerechnet. Außerdem wurden die experimentell ermittelten Spannungs-Dehnungs-Kurven umgerechnet und zusammen mit den Kurven für den Fall 1 in *Abbildung 4.24* und für den Fall 2 in *Abbildung 4.25* dargestellt.

Die Kurven sind zur Übersichtlichkeit auf die makroskopische wahre Dehnung bei Zugfestigkeit des Duplexstahls begrenzt. Zumal nach Erreichen der Zugfestigkeit des Werkstoffes keine höheren Kräfte für ein Versagen des Duplexstahls mehr nötig wären. Zudem lässt sich eine Einschnürung im Modell des Realgefüges nicht darstellen bzw. wäre dies mit starken Konvergenzproblemen verbunden. Deshalb ist die Simulation einer Einschnürung im Modell nicht vorgesehen. Aus den Diagrammen in der *Abbildung 4.24* und *Abbildung 4.25* ist zu erkennen, dass die numerische Simulation mit dem Modell des Realgefüges ähnliche Ergebnisse liefert wie das einfache Modell in *Kapitel 4.2.2.1*, *Abbildung 4.21*. Im Vergleich ist jedoch gut zu erkennen, dass das Modell des Realgefüges einen Mix der beiden Grenzfälle zeigt.

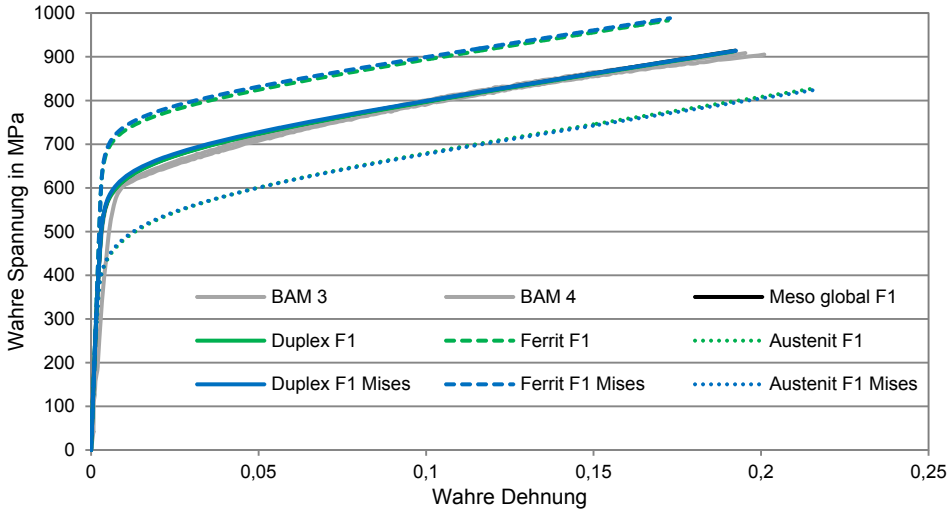


Abbildung 4.24: Numerisch ermittelte wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen und resultierende makroskopische Fließkurve des Duplexstahls für Fall 1 (F1), Modell des Realgefüges

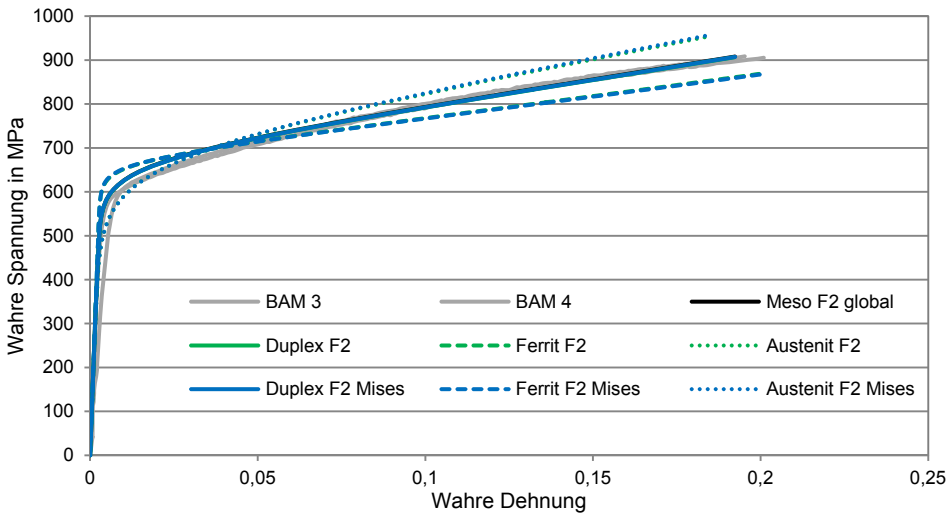


Abbildung 4.25: Numerisch ermittelte wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen und resultierende makroskopische Fließkurve des Duplexstahls für Fall 2 (F2), Modell des Realgefüges

Für den Fall 1 der Werkstoffkennwerte ergibt sich eine weniger starkere Differenz der phasenspezifischen Dehnungen am Ende der Belastung als im Fall der Reihenbelastung des einfachen Modells (siehe *Abbildung 4.21b*). Jedoch ist die Differenz der Spannungen in den Phasen größer. Für den zweiten simulierten Fall der Werkstoffkennwerte ist zu sehen, dass die ferritische Phase bei diesem Werkstoffverhalten die höheren Dehnungswerte erreicht. Dies resultiert aus der starken Verfestigung des Austenits, was zu einer höheren Beanspruchung des Ferrits führt. Wie bereits beschrieben, weisen die Autoren von [67] und [68]

darauf hin, dass für ein zweiphasiges Gefüge die weichere Phase immer stärker verformt wird und die härtere Phase höhere Spannungen erfährt. Diese Aussage wird auch in beiden Fällen der hier durchgeführten Simulationen bestätigt.

Hinsichtlich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung würde das phasenspezifische mechanische Verhalten im zweiten Fall (*Abbildung 4.25*) bedeuten, dass bei höherer Beanspruchung ein höheres Risiko für eine Rissbildung resultiert, da sich hier makroskopisch eine höhere Dehnung bzw. eine höhere plastische Verformung im  $\delta$ -Ferrit ergibt. Der Austenit hingegen hat in diesem Fall die geringere Verformung erfahren.

Die dargestellten Wertepaare der phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen repräsentieren nur den Mittelwert der in der jeweiligen Phase vorliegenden Beanspruchung. Dennoch verkörpern sie auch die makroskopischen Beanspruchungsgrößen des Duplexstahls. Die Autoren von [68] beschreiben zudem, dass in den Phasen nur der deviatorische Anteil der Spannungskomponenten die Verformung des Werkstoffes beeinflusst. Die hydrostatischen Spannungen haben keinen Einfluss auf die Verformung. In realen mehrphasigen Gefügen, so die Autoren, wird es örtliche Schwankungen geben, welche auf die Vergleichsspannung einen anderen Einfluss haben als auf die Spannungskomponenten selbst.

Für die Dehnungen gilt Ähnliches, berichten Fischmeister und Karlsson [68]. Auch hier würde eine negative Dehnung in der Berechnung der Vergleichsdehnung nur einen positiven Beitrag leisten und eine Aussage zur effektiven Dehnung, welche die Verfestigung beeinflusst, ist ohne Betrachtung der einzelnen Dehnungskomponenten nicht möglich. Deshalb ist die Mischungsregel von Tamura et al. [50] auch nur für die Mittelwerte der jeweiligen richtungsabhängigen Komponenten der Spannungen und Dehnungen in den Phasen gültig.

Für einen Vergleich wurden neben den Kurven aus der Komponente der Belastungsrichtung (x-Richtung), auch die ermittelten Kurven für die Vergleichsspannung und Vergleichsdehnung dargestellt. Zu sehen ist, dass die jeweiligen Spannungs-Dehnungs-Kurven nach von Mises und die jeweiligen Spannungs-Dehnungs-Kurven der x-Komponente nahezu identisch sind. Dies resultiert aus der Beanspruchung des Gefüges in nur einer Richtung, also längs der Gefügeorientierung. Die sich ergebende Komponente quer zur Orientierung des Gefüges hat in diesem Fall kaum einen Einfluss auf die Verformung des Werkstoffes.

Im Vergleich der aus den Phasenspannungen und Phasendehnungen berechneten makroskopischen Kurven und den experimentell ermittelten Kurven ist eine gute Übereinstimmung festzustellen. Daher wird davon ausgegangen, dass die numerische Simulation das phasenspezifische mechanische Verhalten im Duplexstahl sehr gut abbildet. Da die Kurven der Vergleichsspannungen und Vergleichsdehnungen maßgeblich über die Beanspruchungskomponente in x-Richtung bestimmt wird, kann in diesem Fall auch die Mischungsregel von Tamura et al. [50] für die Berechnung des makroskopischen Verhaltens verwendet werden.

Aus den Ergebnissen lässt sich ableiten, dass das Modell des Realgefüges das phasenspezifische sowie das makroskopische Verhalten des Duplexstahls sehr gut abbilden kann und die makroskopischen Kurven sehr gut mit den experimentell ermittelten Kurven über-

einstimmen. Für den hier simulierten Fall der Beanspruchung des Realgefüges ist die Spannungs-Dehnungs-Komponente in Belastungsrichtung entscheidend für die Verformung des Gefüges. Die Feststellungen, dass die weichere Phase immer bevorzugt gedehnt und die festere Phase höher belastet wird [67, 68], kann für die durchgeführten Simulationen für beide Fälle des Werkstoffverhaltens bestätigt werden. Im Vergleich der beiden Fälle des Werkstoffverhaltens erscheint nur der erste Fall (keine Überschneidung der Fließkurven) als sinnvoll, da nur in diesem Fall die austenitische Phase die höheren Dehnungen erfährt. Der zweite Fall der Werkstoffkennwerte ist hinsichtlich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung bei höherer Beanspruchung des Gefüges als kritischer einzustufen, da hier die ferritische Phase bevorzugt plastisch verformt wird. Experimentell wird zumeist jedoch für die austenitische Phase eine größere Verformung (Dehnung) festgestellt, die in diesem Fall nicht auftreten würde. Aus diesen Gründen sollen für weitere Betrachtungen zur Rissimulation die phasenspezifischen Werkstoffkennwerte des ersten Falls als Grundlage dienen.

### 4.2.3 Phasenspannungen und -dehnungen aus makroskopischer Beanspruchung

Die bisher ausgewerteten Spannungen und Dehnungen stellen nur Mittelwerte der in den Phasen real vorliegenden Werte dar und eine Aussage über eine risskritische Beanspruchung im Duplexgefüge ist nur eingeschränkt möglich. Bedingt durch die Form, Anordnung und Orientierung der Phasen im Gefüge können sich lokal sehr hohe Beanspruchungsspitzen ergeben, wie es bereits von Johansson et al. [36] für ein Duplexgefüge gezeigt wurde, *Abbildung 2.8*. Diese sehr hohen lokalen Spannungen und Dehnungen sind dann letztendlich für eine Rissinitiation im Gefüge entscheidend. Zur Analyse der Verteilung der Spannungen und Dehnungen im Duplexgefüge sowie für die Lokalisierung risskritischer Bereiche ist eine getrennte Betrachtung der Phasen notwendig. Um die phasenspezifische Reaktion des Duplexwerkstoffes auf eine makroskopische Beanspruchung des Werkstoffes zu ermitteln, wurde die makroskopische Beanspruchung der Zugprobe auf das Modell des Realgefüges übertragen, wie in *Kapitel 3.2.3* beschrieben. Zudem ist so ein Vergleich zwischen dem makroskopischen und dem phasenspezifischen Verhalten möglich und die Übertragbarkeit der Ergebnisse ist gegeben.

Zunächst wurde ein Zugversuch mit der zweidimensionalen Zugprobe simuliert, um die resultierenden Verschiebungen im Messbereich der Zugprobe aufzunehmen. Für die Simulation wurde eine globale Verschiebung von 10 % (10 mm) innerhalb von 100 s auf die Zugprobe (100 mm) aufgeprägt. Daraus resultieren eine globale Dehngeschwindigkeit von  $0,1 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$  und eine Dehnrage von  $0,0025 \text{ s}^{-1}$  im Prüfbereich der Zugprobe. Für die Ermittlung der Verschiebungen wurde ein Element in der Mitte der Zugprobe ausgewählt und die Verschiebungen aller vier Eckknoten in x- und y-Richtung für jeden Zeitschritt von 0,1 s aufgezeichnet. Die makroskopische Dehnung der Zugprobe von 10 % ergibt im Prüfbereich eine globale Verschiebung im Element von rund 0,0231 mm in x-Richtung (Belastungsrichtung). Mit der Ausgangslänge des Elements quadratischer Fläche von 0,1 mm ergibt sich daraus eine lokale Dehnung im Prüfbereich von 23,1 %. Nach 86,7 Sekunden und einer makroskopischen Dehnung von 8,67 % ist im Prüfbereich und global für das Element bereits die makroskopische Dehnung bei Zugfestigkeit des Duplexstahls von 20 % erreicht. Diese Werte und die Zeiten korrespondieren gut mit den experimentell aufgezeichneten

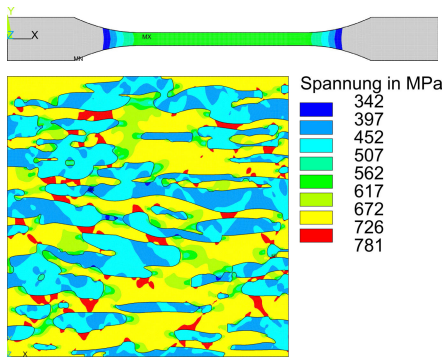
Werten. In *Abbildung 4.26* ist die simulierte Verteilung der resultierenden wahren Vergleichsspannungen in den Phasen des Duplexstahls für die makroskopischen Verschiebungen der Zugprobe von 0,29 %, 2,23 % und 8,67 % der Ausgangslänge für beide Fälle des Werkstoffverhaltens dargestellt. Die makroskopischen Verschiebungen resultieren in einer globalen Dehnung des Mesomodells von 0,5 %, 5 % und 20 %. Der Punkt 0,5 % liegt vor und der Punkt 5 % nach der Überschneidung der phasenspezifischen Fließkurven im zweiten Fall. Zum Vergleich sind jeweils die in der Zugprobe vorliegenden wahren Vergleichsspannungen in der gleichen Skalierung der Farbkontur dargestellt. Die Zugprobenköpfe sind grau, d.h. in diesem Fall, dass die Spannungen in diesem Bereich unterhalb der kleinsten Spannung des in der farbigen Skala angegebenen Intervalls liegen.

Bedingt durch die makroskopische Verlängerung der Probe resultiert mit zunehmender Belastung eine Verlängerung des Modells des Realgefüges in Belastungsrichtung sowie eine Stauchung quer zur Belastungsrichtung. Durch die gleiche Skalierung der Bilder in Bezug zur Ausgangsgröße ergibt sich somit ein kleineres Abbild des Modells mit zunehmender Belastung.

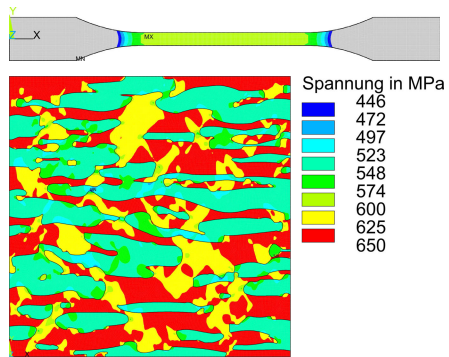
Bei Betrachtung der aus makroskopischer Belastung resultierenden Spannungen in *Abbildung 4.26* ist zu sehen, dass das Intervall der Spannungen für den ersten Fall des angenommenen Werkstoffverhaltens größer ist als im zweiten Fall. Dieser Unterschied resultiert aus der Differenz der phasenspezifischen Fließkurven zueinander und zur makroskopischen Fließkurve des Duplexstahls. Im Vergleich der Spannungen für eine globale Dehnung von 0,5 % des Modells ist zu sehen, dass in beiden Fällen im  $\delta$ -Ferrit eine höhere Beanspruchung zu verzeichnen ist als im Austenit. Dabei liegt die höchste Beanspruchung für den ersten Fall in der ferritischen Phase in Bereichen schmaler ferritischer Stege, die von größeren austenitischen Bereichen umsäumt sind.

Im zweiten simulierten Fall sind die Spannungen in der ferritischen Phase etwas gleichmäßiger in der Phase verteilt. Bei 5 % globaler Dehnung des Modells des Realgefüges (*Abbildung 4.26c* und *Abbildung 4.26d*) ist im zweiten Fall der Wechsel zwischen weicher und fester Phase bereits erfolgt. Daraus resultiert im Modell ein Lastwechsel und die austenitische Phase trägt jetzt höhere Spannungen. Mit zunehmender globaler Dehnung im Modell des Realgefüges auf 20 % steigen die Spannungen in beiden Phasen zunehmend an, wobei im ersten Fall die ferritische Phase die höchsten Spannungen aufweist. Im zweiten simulierten Fall trägt der Austenit diese Last, aber auch im  $\delta$ -Ferrit liegen hohe Spannungen nahe der makroskopischen wahren Zugfestigkeit des Duplexstahls von circa 900 MPa vor.

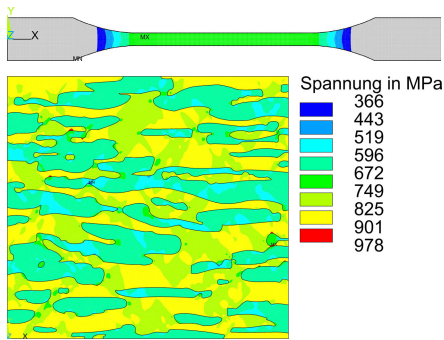




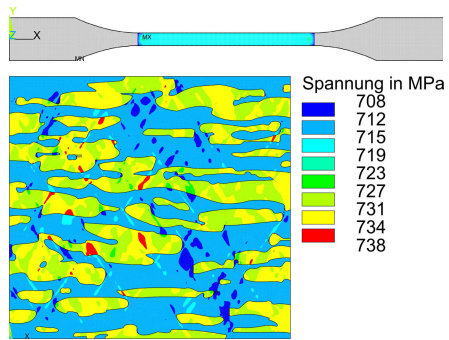
a) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 0,5 % globaler Dehnung, Fall 1



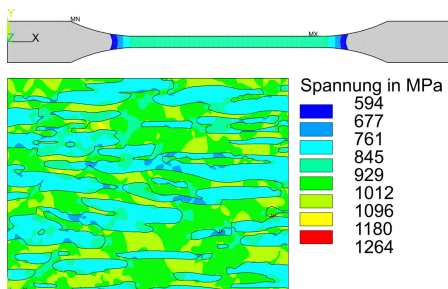
b) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 0,5 % globaler Dehnung, Fall 2



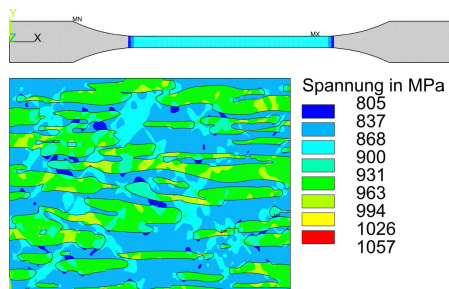
c) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 5 % globaler Dehnung, Fall 1



d) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 5 % globaler Dehnung, Fall 2



e) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 20 % globaler Dehnung, Fall 1



f) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 20 % globaler Dehnung, Fall 2

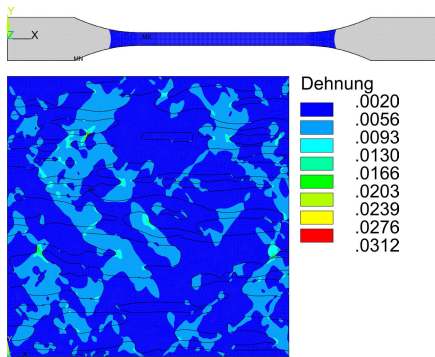
Abbildung 4.26: Simulierte Verteilung der wahren Spannung (von Mises) in den Phasen des Duplexgefüges resultierend aus der makroskopischen Beanspruchung der Zugprobe für Fall 1 und Fall 2

Interessanter ist jedoch die Betrachtung der zugehörigen phasenspezifischen wahren Dehnungen in *Abbildung 4.27*, da diese primär, ob mit oder ohne Einfluss der schädigenden Wirkung von Wasserstoff, für eine Werkstoffschädigung entscheidend sind. Qualitativ verhält sich die Verteilung der wahren Dehnungen in den Phasen des Duplexstahls ähnlich wie die Spannungen, jedoch gibt es hier kleine interessante Unterschiede. Auch die Intervalle der vorliegenden Dehnungen im Gefüge sind für den ersten simulierten Fall des Werkstoffverhaltens größer. Die Ursache dafür liegt in der Differenz der Fließkurven als auch am Verfestigungsverhalten der Phasen. Mit zunehmender Beanspruchung des Gefüges wird die weichere Phase des Werkstoffes bevorzugt gedehnt. Da hier kein Wechsel des Verfestigungsverhaltens auftritt, hat die austenitische Phase kurz nach Beginn der plastischen Verformung beider Phasen bereits eine höhere plastische Dehnung als die ferritische Phase. Im zweiten simulierten Fall wird auch zunächst die austenitische Phase bevorzugt plastisch verformt. Jedoch ändert sich dies nach Überschneidung der Fließkurven und die ferritische Phase nimmt dann die größere Verformung auf.

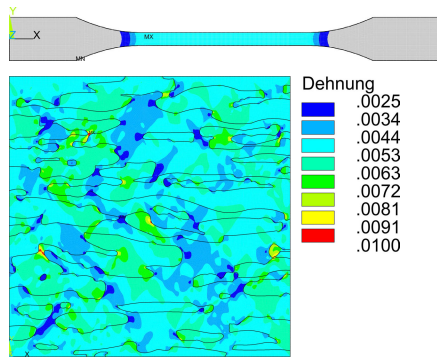
Für eine globale Beanspruchung des Modells des Realgefüges von 0,5 % Dehnung korreliert die Verteilung der Dehnung noch sehr gut mit den vorliegenden Spannungen im Gefüge. In den Bereichen hoher Dehnungen in der jeweiligen Phase sind auch die höchsten Spannungen zu finden. Umgekehrt sind kleinere Spannungen in Bereichen geringerer Dehnung im Gefüge auszumachen. Dieses Verhalten resultiert aus der noch sehr geringen plastischen Verformung im gesamten Gefüge bei dieser Beanspruchung. Dennoch sind in beiden Fällen lokal sehr hohe Dehnungen vorhanden. Im ersten Fall in Höhe von circa 3 % und im zweiten Fall in Höhe von circa 1 %. In beiden Fällen liegen die Dehnungsspitzen in der austenitischen Phase vor, da diese in beiden Fällen eine geringere Fließgrenze besitzt und bereits teilweise plastisch verformt wurde. Die höchste Verformung erfolgt in den schmalen Bereichen der Übergänge zwischen den austenitischen Inseln.

Bei einer globalen Dehnung von 5 % sind die höchsten Dehnungen ebenfalls in der austenitischen Phase zu finden, da diese schon stärker verformt wurde. Aber auch in den schmalen ferritischen Bereichen längs der Belastungsrichtung liegen bereits hohe Dehnungen vor, *Abbildung 4.27c* und *Abbildung 4.27d*. Für den zweiten simulierten Fall ist in *Abbildung 4.27d* zu sehen, dass sich im Gefüge in bevorzugten Bereichen und in einer bevorzugten Orientierung zur Belastungsrichtung (in einem Winkel von 45°) hohe Dehnungen ausbilden. Diese Scherbandbildung wurde auch in den numerischen Simulationen von Sun et al. [203] für einen martensitisch-ferritischen Stahl festgestellt. Die Autoren finden eine gute Übereinstimmung dieser lokalen Scherbänder mit dem späteren duktilen Versagensmodus im Experiment.

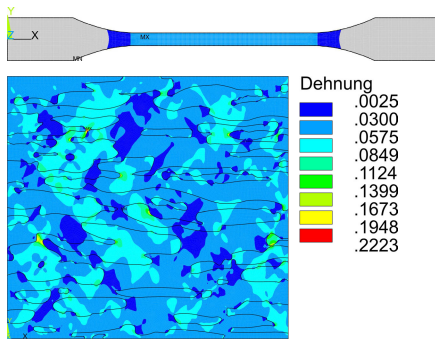
Auch Weber [207] kann eine solche Verteilung des in dieser Arbeit genutzten Schädigungsparameters feststellen, wobei der Schädigungsparameter in erster Linie von der akkumulierten plastischen Dehnung im Gefüge abhängt. Zudem lässt sich eine Abhängigkeit der Verteilung dieser hohen plastischen Dehnungen von der Anordnung der härteren Teilchen in der weichen Matrix erkennen [207]. In Bereichen von Anhäufungen kleiner harter Teilchen in der Matrix tritt diese Scherbandbildung bevorzugt auf, so der Autor. Entlang dieser Scherbänder traten in der Simulation von Weber [207] die Werkstoffschädigungen auf. Für den ersten Fall der in dieser Arbeit angenommenen phasenspezifischen Fließkurven lässt sich ein ähnliches Verhalten erkennen, jedoch sind die Dehnungen weniger stark lokalisiert, *Abbildung 4.27c*.



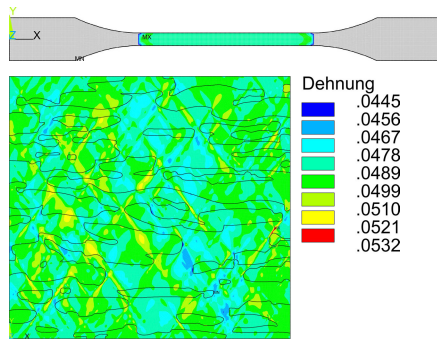
a) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,5 % globaler Dehnung, Fall 1



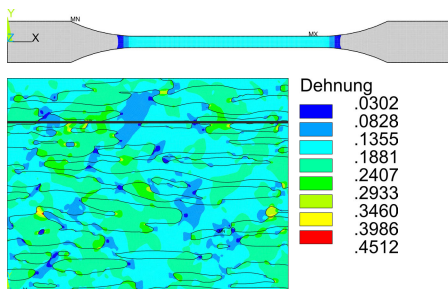
b) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,5 % globaler Dehnung, Fall 2



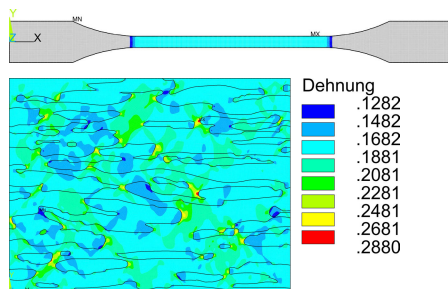
c) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 5 % globaler Dehnung, Fall 1



d) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 5 % globaler Dehnung, Fall 2



e) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 20 % globaler Dehnung, Fall 1; Pfad zur Auswertung der Spannungen und Dehnungen



f) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 20 % globaler Dehnung, Fall 2

Abbildung 4.27: Simulierte Verteilung der wahren Dehnung (von Mises) in den Phasen des Duplexgefüges resultierend aus der makroskopischen Beanspruchung der Zugprobe für Fall 1 und Fall 2; In Abbildung e) ist ein Pfad zur Auswertung der phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen gezeigt

Für eine globale Dehnung des Modells des Realgefüges von 20 % ist im ersten Fall (*Abbildung 4.27e*) zu erkennen, dass sich die Orte der höchsten Beanspruchung im Gefüge mit zunehmender Belastung nicht verändert haben. Im linken oberen Bereich des Modells des Realgefüges zum Beispiel, liegen hohe Dehnungen in den schmalen ferritischen Stegen zwischen 24 % bis 29 % vor. Die höchsten plastischen Verformungen sind in sehr schmalen austenitischen Bereichen zu finden. Im Durchschnitt sind die Dehnungen im Austenit bei dieser globalen Belastung höher als im Ferrit (siehe *Abbildung 4.24*). Für den zweiten angenommenen Fall ergibt sich eine genau umgekehrte Verteilung der Bereiche höchster und geringster Beanspruchung im Gefüge. Dort, wo im ersten Fall im Austenit und  $\delta$ -Ferrit die höchste Dehnung vorlag sind jetzt die geringsten Dehnungen zu finden und umgekehrt für Bereiche geringerer Beanspruchung. Deutlich wird der Wechsel der Beanspruchung im Gefüge bei Betrachtung der wahren Dehnungen und Spannungen für Fall 1 und Fall 2 im Vergleich entlang des in *Abbildung 4.27e* dargestellten Pfades im Modell des Realgefüges, *Abbildung 4.28* und *Abbildung 4.29*.

Die Auswertung entlang des Pfades im Modell lässt erkennen, dass für Fall 1 die höchsten Dehnungen in der austenitischen Phase vorliegen, *Abbildung 4.28*. Für den zweiten Fall stellt sich im Gefüge ein qualitativ spiegelbildlicher Verlauf der Dehnungen ein. Im Mittel sind die Dehnungen entlang dieses Pfades aber identisch, da die gleiche makroskopische Verschiebung wirksam ist. Anders sieht dies für die Spannungen in den Phasen aus, *Abbildung 4.29*. Hier ergibt sich für den zweiten Fall ein etwas höherer Mittelwert als im ersten Fall. Der Pfad im Modell des Realgefüges stellt jedoch nur einen qualitativen Ausschnitt des phasenspezifischen Verhaltens aus dem Duplexgefüge mit circa 60 % Austenit und 40 %  $\delta$ -Ferrit dar. Bedingt durch den Wechsel der Festigkeit der Phasen trägt im zweiten Fall die austenitische Phase bei dieser globalen Beanspruchung die höheren Lasten bzw. Spannungen. Daher ergibt sich im Vergleich auch ein etwas höherer Mittelwert für die Spannungen als im ersten Fall. Hier trägt die ferritische Phase die höhere Last, geht aber nur mit ca. 40 % in den Mittelwert ein.

Im Vergleich ist also ein Wechsel des Ortes der höchsten Beanspruchung (Dehnung) im Gefüge festzustellen und somit würde sich auch eine Veränderung des Ortes einer möglichen Werkstoffschädigung ergeben. Da die Betrachtung der Spannungen und Dehnungen entlang eines Pfades aber nur einen kleinen Ausschnitt aus dem phasenspezifischen Verhalten repräsentieren, lassen sich keine ganzheitlichen Aussagen zum Verhalten der Phasen ableiten. Durch die Betrachtung der gesamten austenitischen bzw. ferritischen Phase lassen sich eher Aussagen zum phasenspezifischen Verhalten und zu risskritischen Bereichen im Gefüge formulieren. Dazu sind in *Abbildung 4.30* die wahren Vergleichsspannungen und -dehnungen bei 20 % globaler Dehnung für beide Phasen einzeln dargestellt.

Für beide Fälle ist ersichtlich, dass die Dehnungen in der austenitischen oder ferritischen Phase des Werkstoffes sehr gut mit den jeweiligen Spannungen korrelieren. Im Austenit ergeben sich im ersten Fall des Werkstoffverhaltens (linke Bildreihe) jedoch weitaus höhere Dehnungen sowie höhere Spannungen als für den zweiten Fall. Die hohen Dehnungen resultieren aus der bevorzugten Verformung der weicheren Phase des Gefüges und sind in den sehr schmalen austenitischen Bereichen vorzufinden, die sich senkrecht zur Belastungsrichtung erstrecken.

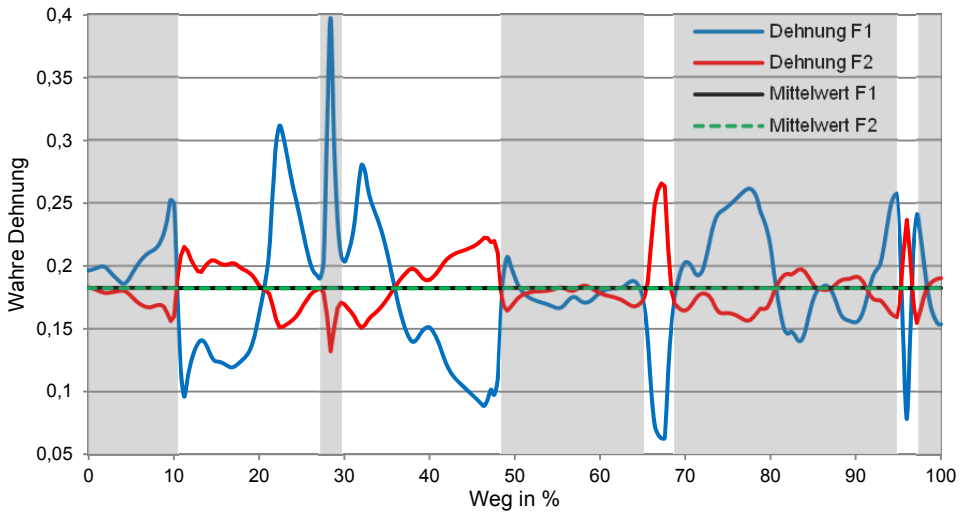


Abbildung 4.28: Vergleich der wahren Dehnung (von Mises) in der austenitischen (grau) und ferritischen (weiß) Phase des Duplexstahls für Fall 1 (F1) und Fall 2 (F2) entlang eines Pfades im Modell des Realgefüges bei 20 % globaler Dehnung

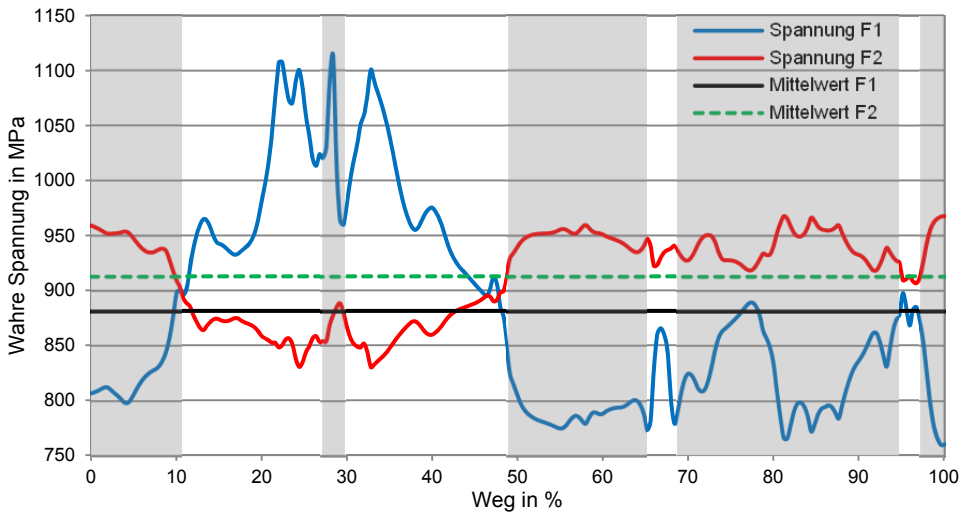
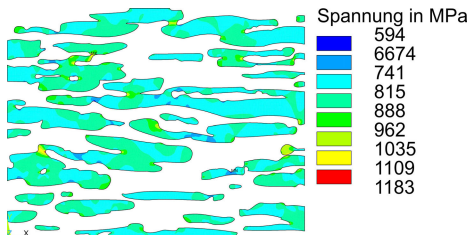
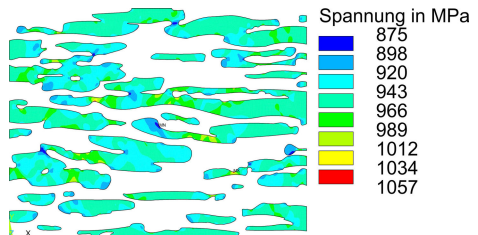


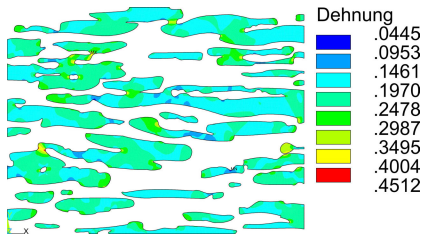
Abbildung 4.29: Vergleich der wahren Spannung (von Mises) in der austenitischen (grau) und ferritischen (weiß) Phase des Duplexstahls für Fall 1 (F1) und Fall 2 (F2) entlang eines Pfades im Modell des Realgefüges bei 20 % globaler Dehnung



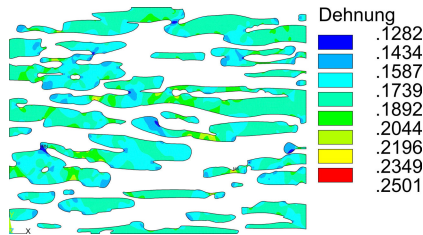
a) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) im Austenit, Fall 1



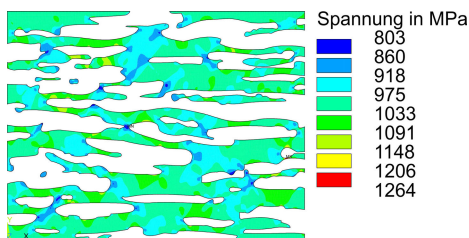
b) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) im Austenit, Fall 2



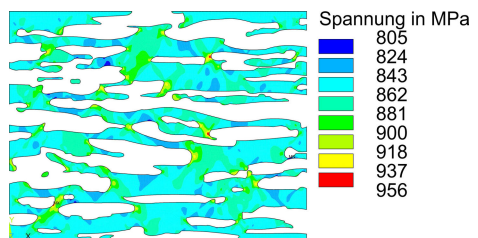
c) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) im Austenit, Fall 1



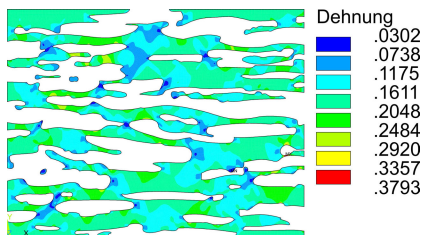
d) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) im Austenit, Fall 2



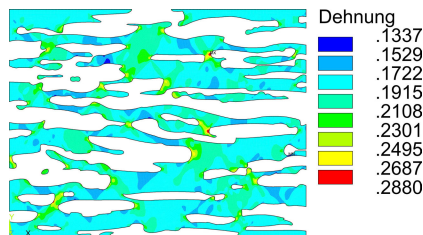
e) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) im Ferrit, Fall 1



f) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) im Ferrit, Fall 2



g) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) im Ferrit, Fall 1



h) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) im Ferrit, Fall 2

Abbildung 4.30: Wahre Vergleichsdehnung und wahre Vergleichsspannung nach von Mises in der austenitischen (a bis d) und ferritischen (e bis h) Phase des Duplexstahls bei 20 % globaler Dehnung des Modells für Fall 1 (linke Bildreihe) und Fall 2 (rechte Bildreihe)

Die ferritische Phase verhält sich sehr ähnlich, jedoch treten im zweiten Fall des Werkstoffverhaltens hohe Beanspruchungen sehr lokal in der Phase auf. Hinsichtlich einer möglichen Werkstofftrennung erscheint dieser Fall zunächst als weitaus kritischer, da sehr hohe Dehnungen im  $\delta$ -Ferrit erreicht werden, sogar leicht höhere Spitzenwerte als in der duktileren austenitischen Phase. Jedoch lässt sich bei genauer Betrachtung der Dehnungsverteilung für Fall 1 feststellen, dass hier höhere Dehnungen im Gefüge vorliegen. Diese sind aber über größere Bereiche in der ferritischen Phase verteilt. Die höchste Dehnung von rund 38 % ist dabei in einem sehr schmalen ferritischen Steg am rechten Rand des Modells, im oberen Drittel der unteren Hälfte zu finden.

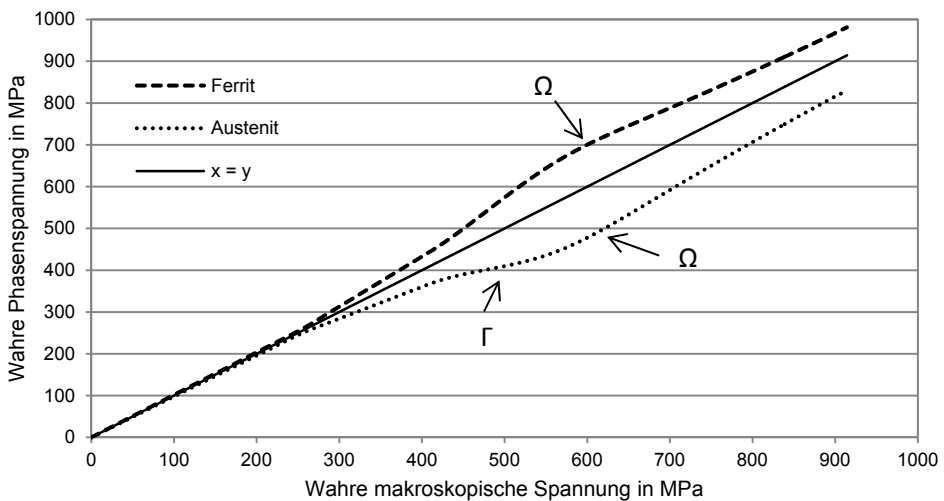
Die Dehnungen in der restlichen ferritischen Phase liegen vermehrt im Bereich zwischen 16 % bis 29 %, genauso hoch wie für den zweiten simulierten Fall des Werkstoffverhaltens. Im Fall 1 treten die hohen Dehnungen vermehrt in schmalen ferritischen Bereichen, die längs der Belastungsrichtung orientiert sind auf. In den schmalen Stegen senkrecht zur Belastungsrichtung sind die geringsten Dehnungen zu finden. Die ferritischen Bereiche sind zumeist auf geraden Wegen von der linken Seite des Modells zur rechten Seite verbunden und lassen sich mit Zugproben vergleichen. Die schmalen Stege stellen dabei den taillierten Bereich der Zugprobe dar. Diese sind von der sehr duktilen und nachgiebigen austenitischen Phase umsäumt. Der Kraftfluss wird in diesen Bereichen konzentriert und der Werkstoff entsprechend hoch beansprucht. Je schmaler die Stege, also je stärker die Taillierung, desto höher die Beanspruchung. Im Fall der senkrecht zur Belastungsrichtung liegenden ferritischen Stege wird der taillierte Bereich durch die Verformung der weicheren austenitischen Phase vor und hinter dem Steg entlastet. Daher tritt in diesen Bereichen nur eine geringe Beanspruchung auf. Im zweiten Fall der angenommenen phasenspezifischen Fließkurven ist der Austenit mit zunehmender Beanspruchung die festere Phase und der  $\delta$ -Ferrit lässt sich leichter verformen. Daher entsteht hier genau der umgekehrte Effekt für die phasenspezifische Beanspruchung des Gefüges. Aufgrund der Orientierung des Gefüges und die hier simulierte Belastung längs der Orientierung ergeben sich daher für Fall 2 „hot spots“ der Beanspruchung in der risskritischen ferritischen Phase und für den Fall 1 ist die Beanspruchung auf größere Bereiche im Gefüge verteilt.

Ähnliche Ergebnisse wurden auch in der Arbeit von Johansson et al. [36] für einen Duplexstahl erzielt. In den numerischen Simulationen der Autoren zur Verteilung der Phasenspannungen wurden eine höhere Fließgrenze und ein stärkeres Verfestigungsverhalten in der austenitischen Phase angenommen. Die festere Phase wies auch hier die höheren Spannungen auf, welche in taillierten Bereichen längs der Belastungsrichtung lokalisiert waren. In der weicheren Phase, in diesem Fall der  $\delta$ -Ferrit, wurde insgesamt ein geringeres Spannungsniveau festgestellt. Die Beanspruchungsspitzen lagen in schmalen Stegen quer (senkrecht) zur Belastungsrichtung, wie es auch in der eigenen Simulation für die weichere Phase festgestellt wurde. Die erzielten Ergebnisse korrelieren sehr gut mit den theoretischen und numerischen Betrachtungen in *Kapitel 2.2* und *Kapitel 2.4*.

Hinsichtlich einer Werkstoffschädigung sind beide Werkstoffverhalten als kritisch einzustufen, da in beiden Fällen ähnlich hohe Dehnungen in der ferritischen Phase entstehen. Unter Berücksichtigung der Risscharakteristik solcher Gefüge (*Kapitel 2.3.3*) ist der zweite angenommene Fall bei höherer Beanspruchung des Gefüges als kritischer einzustufen. Entsteht eine Werkstofftrennung in Bereichen hoher lokaler Dehnungen und schreitet senkrecht zur Belastungsrichtung fort, so wird im zweiten Fall ein größerer Werkstoffbereich in der ferriti-

schen Phase geschädigt, bevor der Riss im Austenit arretieren kann. Denn hier liegen dann große ferritische Regionen vor und hinter der entstandenen Werkstofftrennung senkrecht zur Belastungsrichtung, in denen der Riss fortschreiten kann. Im ersten angenommenen Fall des Werkstoffverhaltens sind diese Bereiche schmaler und von großen austenitischen Inseln umsäumt. Dennoch besteht auch hier die Möglichkeit der Arretierung des Risses. Festzustellen bleibt, dass wenn die ferritische Phase die festere Gefügephase im Duplexstahl ist (Fall 1), schmale taillierte Bereiche längs der Belastungsrichtung als risskritische Zonen zu betrachten sind. Ist die ferritische Phase weicher als der Austenit oder kommt es zu einem Wechsel des mechanischen Verhaltens (Fall 2), dann stellen die taillierten Bereiche senkrecht zur Belastungsrichtung Orte für eine mögliche Rissinitiierung dar. Für die Rissimulation wird, gleichwohl der vorangegangenen Betrachtung, nur der erste Fall des Werkstoffverhaltens angenommen, da hier die höheren Dehnungen in der zumeist duktileren austenitischen Phase auftreten, wie es auch für die realen Gefüge experimentell festgestellt werden kann (*Kapitel 2.2*).

Für einen Vergleich der numerisch erzielten Ergebnisse mit den experimentell ermittelten Ergebnissen aus den Arbeiten von Dakhlaoui et al. [58, 59] sind in *Abbildung 4.31* und *Abbildung 4.33* die phasenspezifischen Spannungen als Funktion der wahren makroskopisch aufgeprägten Spannung für Fall 1 und Fall 2 dargestellt. In *Abbildung 4.32* sind zum Vergleich die phasenspezifischen Spannungen für den Duplexstahl UR45N (X2CrNiMoN22-5-3) dargestellt. In den Diagrammen markiert  $\Gamma$  die ermittelte Fließgrenze der austenitischen Phase und  $\Omega$  die ermittelte Fließgrenze der ferritischen Phase.



*Abbildung 4.31: Wahre Phasenspannungen in Abhängigkeit der wahren makroskopischen Spannung des Modells des Realgefüges für Fall 1*

Für den ersten simulierten Fall des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens ist eine gute qualitative Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Ergebnissen (*Abbildung 4.32*) zu erkennen. Zu Beginn der Beanspruchung des Werkstoffes verlaufen die Spannungen in den Phasen noch parallel mit der makroskopisch aufgeprägten Spannung. Die zunehmend langsame Abweichung der Phasenspannungen von der makroskopischen



Spannung resultiert aus der sehr lokalen plastischen Verformung der austenitischen Phase bei geringer makroskopischer Beanspruchung, wie vorangegangen schon gezeigt wurde. Die plastische Verformung der austenitischen Phase beginnt im Punkt  $\Gamma$  (430 MPa) und die Last wird auf die noch elastische ferritische Phase übertragen. Daher ist in diesem Punkt für die Kurve des  $\delta$ -Ferrits eine Zunahme im Anstieg zu erkennen und die Differenz der Spannungen zwischen der austenitischen und ferritischen Phase wird größer. Mit zunehmender Last fängt auch die ferritische Phase an sich plastisch zu verformen (Punkt  $\Omega$ , 715 MPa). Durch die stärkere Verfestigung im Austenit wird nun wieder eine etwas höhere Last auf die austenitische Phase übertragen und die Differenz der Spannungen in den Phasen wird wieder kleiner. Dies ist deutlicher in den experimentell ermittelten Kurven zu erkennen. Die Autoren [58] geben an, dass das arithmetische Mittel der Phasenspannungen der makroskopischen Spannung entspricht. Auch für die numerische Simulation ergibt sich aus den Phasenspannungen, gewichtet über die Phasenanteile, die makroskopische Spannung. Der verwendete Duplexwerkstoff in [58] hat ein Phasenverhältnis von 50:50 und die Autoren bestimmen die Fließgrenze der austenitischen Phase mit 370 MPa und die der ferritischen Phase mit 620 MPa. Die makroskopische Fließgrenze des Duplexwerkstoffs wird mit 480 MPa und die Zugfestigkeit mit 680 MPa angegeben.

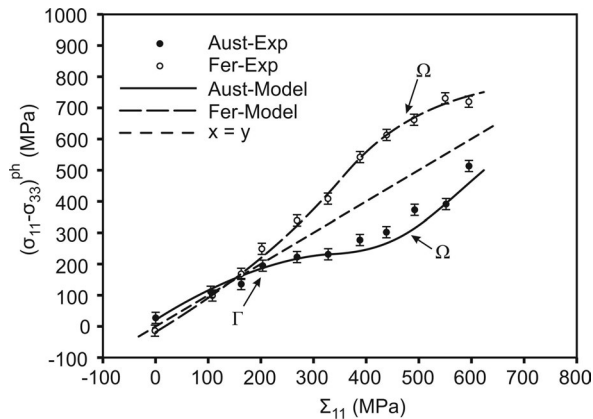


Abbildung 4.32: Experimentell ermittelte Phasenspannung in Abhängigkeit der aufgeprägten makroskopischen Spannung aus der Arbeit von Dakhlouei et al. [58]

Für den zweiten Fall des simulierten Werkstoffverhaltens ergibt sich keine so deutliche Übereinstimmung mit den experimentellen Kurven. Bereits vor Erreichen der eigentlichen Fließgrenze des Austenits (Punkt  $\Gamma$ , 520 MPa) ist ein starke plastische Verformung für die austenitische Phase erkennbar und es ergibt sich eine scheinbare Fließgrenze (Punkt  $\Gamma'$ , circa 430 MPa). Aber im Vergleich ist zu erkennen, dass sich auch im Experiment die austenitische Phase scheinbar vor der festgestellten Fließgrenze der Phase von 370 MPa plastisch verformt. Zu bedenken ist jedoch, dass die dargestellten Werte über die jeweilige Phase gemittelt sind und nur die durchschnittliche Beanspruchung der Phase wiedergibt. Je größer die Bereiche in denen schon eine plastische Verformung stattgefunden hat, desto niedriger fällt die mittlere phasenspezifische Fließgrenze aus. Da in beiden simulierten Fällen die austenitische Phase die geringere Fließgrenze besitzt, wird diese zu Beginn auch bevorzugt verformt und es können lokal bereits plastische Dehnungen akkumulieren. Das Verhalten der Phase hängt jedoch auch von der Form, Anordnung und Orientierung

der Phasen im Gefüge sowie der Verfestigung der einzelnen Phasen ab. Jedoch kommt es im zweiten simulierten Fall auch zu einer Überschneidung der phasenspezifischen Kurven, was in den Arbeiten von Dakhlaoui et al. [58] nicht beobachtet wurde. Die Kurven nähern sich im Experiment zwar wieder stärker an als im ersten simulierten Fall, dennoch ist bis zum Erreichen der makroskopischen wahren Zugfestigkeit keine Überschneidung erkennbar. Über die Phasenspannungen nach Beginn der Einschnürung in der Probe werden in der Arbeit keine Aussagen getroffen. Abschließend bleibt für diesen Vergleich festzuhalten, dass der erste simulierte Fall des Werkstoffverhaltens im Vergleich besser mit dem Experiment übereinstimmt. Dennoch kann hier keine endgültige Aussage getroffen werden, da im realen Gefüge weitere Faktoren, wie Kristallorientierung, Korngröße, Einschlüsse, Ausscheidungen, die mechanische Historie des Gefüges sowie Inhomogenität der mechanischen Eigenschaften in den Phasen Einfluss auf das mechanische Verhalten der Phasen haben. Diese Faktoren wurden in dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt. Dennoch ist eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen numerischer Simulation und Experiment feststellbar.

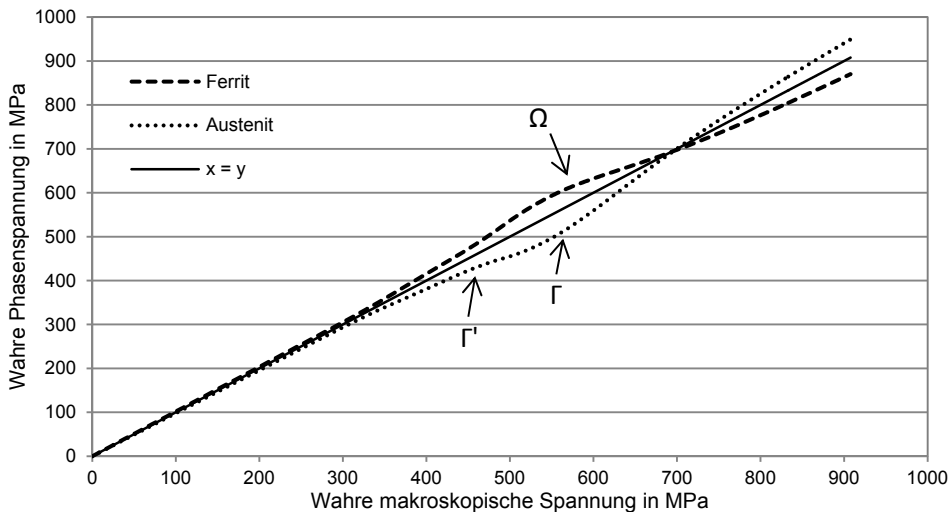


Abbildung 4.33: Wahre Phasenspannungen in Abhängigkeit der wahren makroskopischen Spannung des Modells des Realgefüges für Fall 2

Zusammenfassend lässt sich für die phasenspezifische mechanische Analyse festhalten, dass eine globale Dehnung des Realgefüges in beiden Phasen zu einer höheren Beanspruchung führt und sehr lokal bereits plastische Verformung in den Phasen auftritt. Die inhomogene Verteilung der Spannungen und Dehnungen in den Phasen des Duplexstahls resultiert aus der Form der Phasenbestandteile und deren Anordnung zur Belastungsrichtung. In Abhängigkeit vom mechanischen Verhalten der austenitischen und ferritischen Phase ergibt sich für die festere Phase eine hohe Beanspruchung in taillierten Bereichen, die längs der Belastungsrichtung orientiert sind. In der weicheren Phase sind die höchst beanspruchten Bereiche in schmalen Stegen mit einer Ausrichtung senkrecht zur Belastungsrichtung zu finden und weitaus lokaler im Gefüge verteilt („hot spots“). Aus den angenommenen phasenspezifischen Verhalten ergeben sich im Vergleich der beiden Fälle

untereinander unterschiedliche kritische Bereiche für eine mögliche Werkstoffschädigung in der ferritischen Phase. Die erzielten Ergebnisse befinden sich in sehr guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen numerischer Betrachtungen an vergleichbaren Stählen sowie mit experimentell ermittelten Werten. Unter Berücksichtigung der erzielten Ergebnisse, im Vergleich mit Arbeiten zum Duplexwerkstoff anderer Autoren, wird der erste Fall des mechanischen Verhaltens als sinnvoller erachtet und für die weiteren Simulationen der Werkstoffschädigung genutzt. Es wird jedoch nicht ausgeschlossen, dass auch der zweite angenommene Fall das mechanische Verhalten von Duplexstählen abbildet. Zumal dieses Verhalten auch von anderen Autoren beobachtet wurde (siehe *Kapitel 3.2.3*). Wahrscheinlich ergibt sich auch ein Mix aus beiden Fällen für das mechanische Verhalten in realen Duplexwerkstoffen. Jedoch ist die genaue Bestimmung nur schwer möglich, da es zum einen keine exakten Vergleichswerkstoffe gibt und zum anderen viele Faktoren auf das mechanische Verhalten der Phasen wirken.

### 4.3 Numerische Simulation der Werkstoffschädigung

Die Durchführung der numerischen Simulation der Werkstoffschädigung erfolgt auf Grundlage der in *Kapitel 4.1* und *Kapitel 4.2* erzielten Ergebnisse des Wasserstofftransportverhaltens, des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens und den in *Kapitel 3.2.4* vorgestellten Risskriterien. Dabei wurden alle numerischen Simulationen entkoppelt voneinander durchgeführt. Das bedeutet, dass das Bruchkriterium nicht für jeden Zeitschritt und jedes Element im Risspfad in Abhängigkeit der aktuell vorliegenden Wasserstoffkonzentration neu berechnet wurde, wie es zum Beispiel in den Arbeiten von Böllinghaus und Hoffmeister [199], Viyanit [25] oder Wongpanya [24] erfolgte. Für die hier erfolgten Simulationen wurde ausgehend vom Wasserstofftransportverhalten angenommen, dass die ferritische Phase des Duplexstahls bei Aufnahme von Wasserstoff im Grundwerkstoff innerhalb kürzester Zeit vollständig mit Wasserstoff gesättigt ist. Der Austenit hingegen bleibt nahezu wasserstofffrei, wie es auch für die Diffusion im Grundwerkstoff gezeigt werden konnte. Auch in experimentellen Untersuchungen konnte die schnelle Sättigung und nahezu homogene Verteilung von Wasserstoff in der ferritischen Phase des Duplexstahls bestätigt werden [106–110]. Zudem reagiert die ferritische Phase des Duplexstahls weitaus empfindlicher gegenüber einer Degradation der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff als die austenitische Phase [19, 20, 25] und eine Rissbildung ist hier wahrscheinlicher. Dies bestätigen auch zahlreiche Untersuchungen zur wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen (siehe *Kapitel 2.3.3*). Ein möglicher Transport von Wasserstoff in den Austenit durch Versetzungsbewegungen an der Risspitze [146, 184] sowie eine martensitische Umwandlung des Austenits [160, 161, 166, 184] wurde nicht simuliert. Ferner ist eine sichere Quantifizierung des mit Versetzungen transportierten Wasserstoffs nicht ohne weiteres möglich und eine martensitische Umwandlung für Duplexstähle oft nicht feststellbar [19, 110] oder hat nur einen geringen Einfluss auf den Rissfortschritt im Austenit [188].

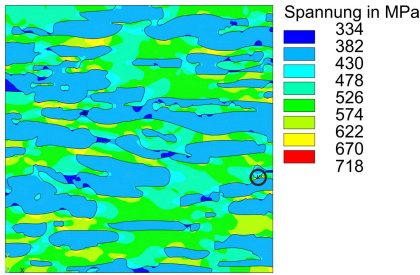
Nachfolgend sollen zunächst mit Hilfe der Element-Elimination-Technique risskritische Bereiche im Duplexgefüge ermittelt werden. Daran anschließend erfolgt die Auswertung und Diskussion der Ergebnisse der simulierten Werkstoffschädigung mit der „node-release“ Technik.

### 4.3.1 Vorbetrachtungen zur Rissimulation unter Nutzung der Element-Elimination-Technique

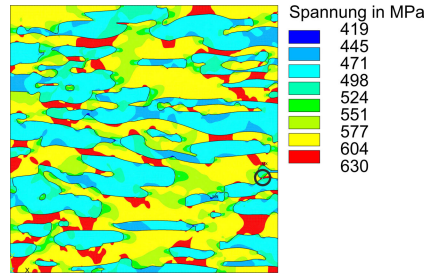
Zunächst wurde für die Ermittlung des Ortes einer möglichen Werkstoffschädigung unter Einfluss von Wasserstoff die Element-Elimination-Technique herangezogen. Für die Durchführung wurde davon ausgegangen, dass in der ferritischen Phase nach kurzer Diffusionszeit eine nahezu homogen verteilte und ausreichend hohe Wasserstoffkonzentration vorliegt, damit diese annäherungsweise keine Duktilität mehr besitzt. Daher wurde als Kriterium eine Dehnung von 0,5 % (Dehngrenze, wahre Dehnung: 0,4988 %) im  $\delta$ -Ferrit verwendet, um ein sprödes Versagen der ferritischen Phase zu simulieren. Für die austenitische Phase hingegen wurde angenommen, dass hier keine ausreichende Wasserstoffakkumulation stattgefunden hat und der Austenit deshalb duktil versagt. Zum Vergleich kamen beide Fälle des Werkstoffverhaltens zur Anwendung. Aufgrund der begrenzten Speicherkapazität und sich ergebenden Konvergenzproblemen wurde die Simulation auf eine maximale globale Dehnung des Modells des Realgefüges von circa 0,5 % begrenzt. In *Abbildung 4.34* sind die Vergleichsspannungen und -dehnungen zu verschiedenen Zeiten des Rissfortschrittes für den ersten und zweiten Fall des Werkstoffverhaltens dargestellt.

Für den ersten Fall des Werkstoffverhaltens (*Abbildung 4.34*, linke Bildreihe) ist zu beobachten, dass bereits kurz nach Erreichen der makroskopischen 0,2 % Dehngrenze der erste Riss im Duplexwerkstoff initiiert, da die Beanspruchung im Gefüge lokal höher ist als die makroskopische Dehnung. Der Riss wird in einem schmalen ferritischen Steg (schwarze Markierung, *Abbildung 4.34a* und *Abbildung 4.34e*) initiiert. Bereits in der Auswertung der Spannungen und Dehnungen im Modell des Realgefüges konnten für diesen schmalen taillierten Bereich im  $\delta$ -Ferrit die höchsten Dehnungen identifiziert werden. Des Weiteren lässt sich feststellen, dass in größeren Bereichen der ferritischen Phase bereits höhere Dehnungen im Bereich um 0,4 % vorliegen. Mit zunehmender Belastung des Modells des Realgefüges initiieren mehrere Risse in der ferritischen Phase, welche zumeist die gesamte Breite der ferritischen Stege zwischen zwei austenitischen Inseln trennen. Die Risse liegen ausschließlich in der ferritischen Phase und verlaufen senkrecht zur Belastungsrichtung bzw. in einem Winkel von 45° entlang der zuvor gezeigten Scherbänder. Die austenitische Phase zeigt bei dieser Beanspruchung noch keine Rissinitiation und arretiert die in der ferritischen Phase verlaufenden Risse.

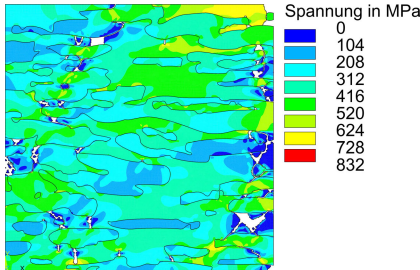
Für den zweiten angenommenen Fall der Werkstoffkennwerte ist ein ähnliches Verhalten zu beobachten (*Abbildung 4.34*, rechte Bildreihe), da auch hier zu Beginn die ferritische Phase die höhere 0,2 % Dehngrenze besitzt. Der erste Riss initiiert im gleichen Bereich der ferritischen Phase wie im ersten Fall. Jedoch findet die Rissinitiation etwas später statt, bei einer globalen Dehnung des Modells des Realgefüges von rund 0,32 %. Grund dafür ist die Differenz der Spannungs-Dehnungs-Kurven zueinander. Diese ist im zweiten Fall geringer, da die phasenspezifischen Kurven näher am makroskopischen Verhalten liegen. Deshalb wird hier mehr Zeit für das Erreichen einer risskritischen Beanspruchung im Gefüge benötigt. Mit der Zunahme der äußeren makroskopischen Belastung initiieren auch hier mehrere Risse in der ferritischen Phase zumeist in den gleichen Bereichen, wie sie auch für den ersten Fall des Werkstoffverhaltens beobachtet wurden. Auch hier zeichnet sich die bevorzugte Werkstofftrennung entlang von Scherbändern ab, jedoch bei einem insgesamt niedrigeren Spannungs- und Dehnungsniveau im Duplexgefüge.



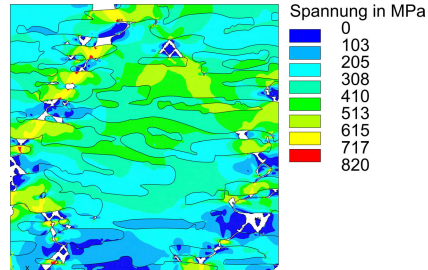
a) Wahre Vergleichsspannungen (von Mises) bei 0,28 % globaler Dehnung, Fall 1



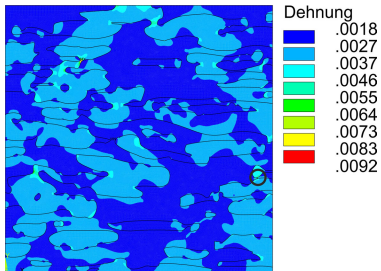
b) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 0,32 % globaler Dehnung, Fall 2



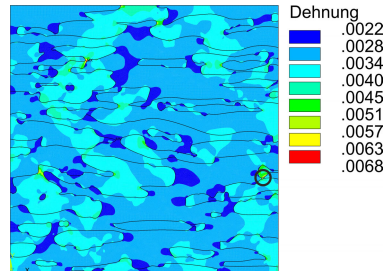
c) Wahre Vergleichsspannungen (von Mises) bei 0,46 % globaler Dehnung, Fall 1



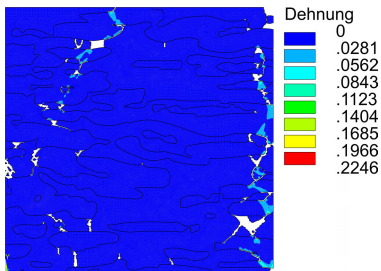
d) Wahre Vergleichsspannung (von Mises) bei 0,46 % globaler Dehnung, Fall 2



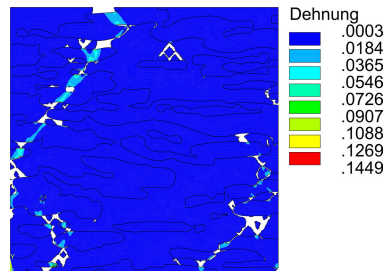
e) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,28 % globaler Dehnung, Fall 1



f) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,32 % globaler Dehnung, Fall 2



g) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,46 % globaler Dehnung, Fall 1



h) Wahre Vergleichsdehnung (von Mises) bei 0,46 % globaler Dehnung, Fall 2

Abbildung 4.34: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung der simulierten Werkstoffschädigung für Fall 1 (linke Bildreihe) und Fall 2 (rechte Bildreihe)

Im Vergleich der beiden Fälle untereinander ist ersichtlich, dass trotz des ähnlichen Verlaufs der Werkstofftrennung kleine Unterschiede auszumachen sind. Im zweiten Fall ist der Verlauf der Werkstofftrennung entlang der Scherbänder noch deutlicher ausgeprägt. Zudem sind im mittleren Bereich des Modells des Realgefüges bei gleicher Beanspruchung größere Werkstofftrennungen in der ferritischen Phase auszumachen. Dennoch wird im zweiten Fall des Werkstoffverhaltens mehr Zeit bis zur Rissinitiierung benötigt, was auch eine größere globale Dehnung bedeutet. Aus diesem Grund ist der erste Fall des angenommenen Werkstoffverhaltens im spröden Versagensfall für diese numerische Simulation als kritischer anzusehen.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass die Element-Elimination-Technique ein hilfreiches Werkzeug zur Ermittlung risskritischer Bereiche unabhängig von vorgegebenen Risspfaden darstellt. Ort und Zeit der Rissinitiierung lassen sich so ermitteln und ein möglicher Rissfortschritt qualitativ abschätzen. Dennoch ist die Simulation des Rissfortschrittes nur bedingt möglich. Zum einen lässt sich mit dieser Technik eine scharfe Rissspitze wie sie zumeist bei einem spröden Riss auftritt nur sehr schwer abbilden. Zum anderen entstehen aus dem Wegfall ganzer Werkstoffbereiche auch starke Konvergenzprobleme, da hierdurch viele freie Knoten vorliegen und die Elementverzerrung sehr hoch ist. Dies lässt sich nicht ohne weiteres bzw. nur durch einen sehr hohen Mehraufwand über die Implementierung von Feder-Dämpfer-Systemen, wie bei der „node-release“ Technik, abfangen. Jedoch gestaltet sich die Implementierung solcher Systeme bei dieser Methode um ein Vielfaches schwieriger und es bleibt nicht auszuschließen, dass durch die Implementierung der Rissfortschritt verändert wird. Um jedoch abzuschätzen, ob bei den gegebenen Bedingungen generell eine Werkstofftrennung eintritt, ist diese Vorgehensweise geeignet. Eine Werkstofftrennung in der austenitischen Phase konnte jedoch bisher nicht abgebildet werden.

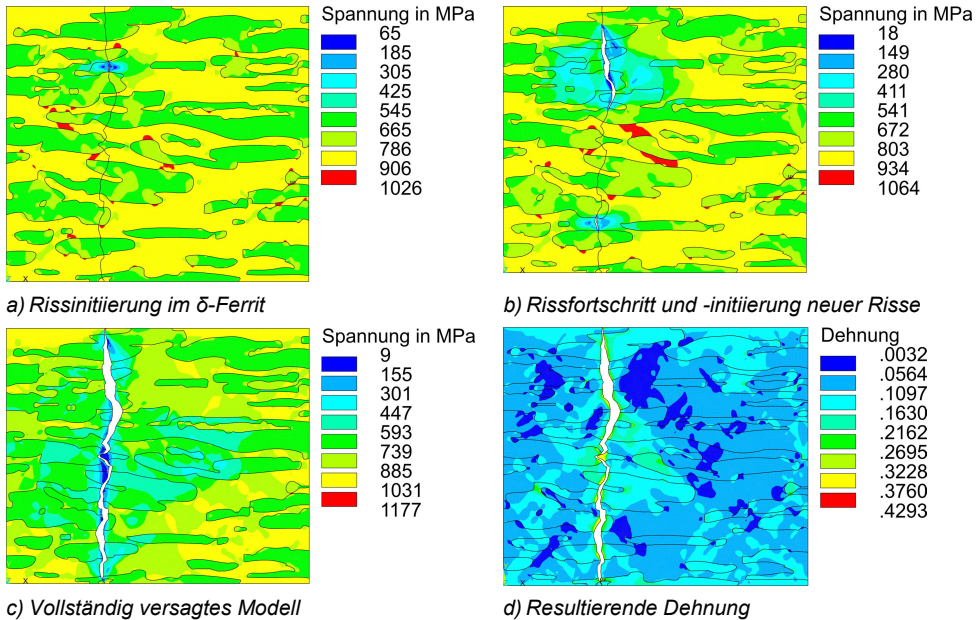
### 4.3.2 Numerische Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung

Aus den vorangegangenen Betrachtungen hervorgehend und unter Berücksichtigung der Verteilung der Spannungen und Dehnungen im Gefüge wurden entsprechende Risspfade im Modell des Realgefüges integriert, um die Simulation der Werkstofftrennung mit der „node-release“ Technik zu realisieren. Mit dieser Methode der Darstellung einer Werkstofftrennung ist die Abbildung einer scharfen Rissspitze möglich und es ergeben sich durch die leicht zu integrierenden Feder-Dämpfer-Elemente weniger starke Konvergenzprobleme. Zudem besteht hier auch die Möglichkeit die Risspfade getrennt voneinander zu betrachten und gegebenenfalls eine gegenseitige Beeinflussung im Rissfortschritt zu ermitteln. Nachfolgend soll zunächst die Simulation der Werkstofftrennung unter Nutzung nur eines Risspfades beschrieben werden, bevor die Diskussion der Ergebnisse der Simulation mit mehreren Risspfaden erfolgt. Für alle folgend beschriebenen Simulationen wurde das phasenspezifische mechanische Verhalten aus Fall 1 verwendet.

### 4.3.2.1 Werkstofftrennung in einem Risspfad

Für die Simulation der Werkstofftrennung durch einen einzelnen Riss wurde der Risspfad C2 in der *Abbildung 3.12* ausgewählt. Dieser Risspfad liegt in einem Bereich, in dem bei der Vorbetrachtung größere ferritische Areale versagten und die Dehnungen in der ferritischen als auch austenitischen Phase sehr hoch sind. Simuliert wurden die beiden Grenzfälle duktiles bzw. sprödes Versagen. Wobei duktiles Versagen meint, dass beide Phasen ihre wahre Dehnung bei der jeweiligen Zugfestigkeit erreichen. Im Fall des spröden Versagens wurde angenommen, dass eine ausreichend hohe Wasserstoffkonzentration in der ferritischen Phase vorliegt, damit diese nahezu ohne plastische Verformung versagt. In der austenitischen Phase hingegen werden die mechanischen Eigenschaften kaum degradiert und die wahre Dehnung bei Zugfestigkeit wird erreicht.

In *Abbildung 4.35* sind die wahren Vergleichsspannungen und -dehnungen nach von Mises für die duktile Werkstofftrennung in beiden Phasen des Duplexstahls zu verschiedenen Zeitpunkten des Rissfortschrittes dargestellt.



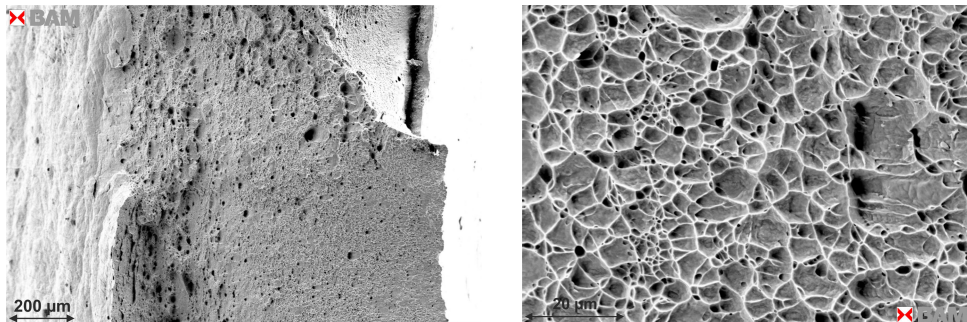
*Abbildung 4.35: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei duktiler Werkstofftrennung entlang des Risspfades C2*

Im Fall des simulierten duktilen Versagens wird der erste Riss bei einer globalen Dehnung von circa 6 % im oberen Drittel des Risspfades in der ferritischen Phase initiiert, *Abbildung 4.35a*. Mit zunehmender makroskopischer Beanspruchung schreitet dieser Riss bis zum Erreichen der austenitischen Phase fort. Zugleich wird ein zweiter Riss in der ferritischen Phase oberhalb des ersten Risses initiiert. Auch dieser Riss wächst weiter durch die ferritische Phase bis zum Erreichen des Austenits. Dadurch werden an den Rissspitzen der arretierten Risse in der austenitischen Phase sehr hohe Dehnungen induziert. Die hohen Dehnungen an der Riss Spitze im Austenit ermöglichen einen schnelleren Rissfortschritt in dieser Phase. Beide Risse wachsen durch die austenitische Phase hindurch zusammen

und schreiten nach oben und nach unten im Risspfad fort, *Abbildung 4.35b* (9,12 % globale Dehnung). Zusätzliche Risse initiieren in der ferritischen Phase und schreiten mit zunehmender äußerer Belastung des Modells des Realgefüges weiter fort, bis zum vollständigen Versagen des Modells bei einer globalen Dehnung von 12,13 %, *Abbildung 4.35c*. Deutlich erkennbar ist die Entlastung in der ferritischen und auch austenitischen Phase in naher Umgebung der bereits entstandenen Risse.

#### Vergleich der Bruchtopographie mit der numerischen Simulation (duktil)

Bei Betrachtung der resultierenden Dehnungen (*Abbildung 4.35d*) ist erkennbar, dass im gesamten Modell plastische Verformungen in der austenitischen und ferritischen Phase vorliegen. Die höchsten Dehnungen sind entlang des Risspfades auszumachen, wobei die höheren Dehnungen in der austenitischen Phase vorzufinden sind. Eine fraktographische Analyse der resultierenden Bruchfläche würde sehr wahrscheinlich duktilen Versagen in beiden Phasen zeigen. Zum Vergleich ist in *Abbildung 4.36* eine Rasterelektronenmikroskop (REM)-Aufnahme der Bruchfläche einer wasserstofffreien Zugprobe aus den ex-situ Versuchen (*Kapitel 4.4.2*) gezeigt. Die Bruchfläche weist Grübchen (engl.: dimples) auf, was auf ein duktilen Versagen durch das Zusammenwachsen von Mikroporen hindeutet. Diese Bruchtopographie ergibt sich auch im Fall des simulierten duktilen Versagens für das Modell des Realgefüges.



a) Übersicht duktile Bruchfläche

b) Detailaufnahme der duktilen Bruchfläche mit „dimples“

*Abbildung 4.36: Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme der Bruchfläche einer duktil versagten Zugprobe des Duplexstahls X2CrNiMoN22-5-3 (Wst.-Nr.: 1.4462)*

Als duktilen Bruchkriterium dienen hier die wahren Dehnungen bei Zugfestigkeit der jeweiligen Phase. Für die austenitische Phase ergibt sich die wahre Dehnung bei Zugfestigkeit zu 26,23 % und in der ferritischen Phase zu 10,44 %. Der Duplexstahl hat eine technische Dehnung (Gleichmaßdehnung) von circa 20 % bei Erreichen der Zugfestigkeit. Festzustellen ist, dass das Modell des Realgefüges bereits bei einer globalen Dehnung von circa 12 % versagte. Daher bleibt festzuhalten, dass die realen mechanischen Kennwerte der Phasen von den hier angenommenen Werten differieren und ein Versagen erst später erfolgen würde als in der numerischen Simulation. Zumal die numerische Simulation nicht alle auf das mechanische Verhalten der Phasen wirkenden Faktoren berücksichtigt. Es müssen zumeist Vereinfachungen und Annahmen getroffen werden, damit die numerische Simulation durchführbar ist. Im realen Versagensfall ist es eher unwahrscheinlich, dass im Gefüge nur ein Riss initiiert und fortschreitet, da es mehrere kritische Bereiche im Gefüge



gibt. Mehrere Risse im Gefüge würden zu Entlastungen führen und der Rissfortschritt würde wahrscheinlich anders verlaufen. Die experimentelle Ermittlung des mechanischen Verhaltens der Phasen gestaltet sich jedoch schwierig, da die Phasen sich im mechanischen Verhalten gegenseitig beeinflussen. Auch sind keine Werkstoffe mit exakt gleicher chemischer Zusammensetzung verfügbar, welche das Verhalten der Phasen wiedergeben. Daher müssen entsprechende mechanische Kennwerte und Bruchkriterien für die numerische Simulation approximiert werden. Zudem haben neben den „load sharing“ Effekten auch andere Faktoren Einfluss auf das mechanische Verhalten der Phasen, siehe *Kapitel 2.2*. Dennoch lässt sich festhalten, dass das numerische Modell des Realgefüges eine sehr gute Annäherung an das reale mechanische Verhalten des Duplexstahls erlaubt und qualitative Aussagen zulässt.

Die Ergebnisse des simulierten spröden Versagens der ferritischen Phase und des duktilen Versagens der austenitischen Phase sind in *Abbildung 4.37* dargestellt. Gezeigt sind die wahren Vergleichsspannungen und -dehnungen nach von Mises zu verschiedenen Zeitpunkten des Rissfortschrittes. Auch im Fall des spröden Versagens werden die ersten Risse in der gleichen Region des Risspfades, in der ferritischen Phase initiiert, *Abbildung 4.37a* (markiert durch schwarze Kreise). Jedoch werden die ersten Risse hier schon bei einer globalen Dehnung von circa 0,4 % initiiert. Als Kriterium für sprödes Versagen in der ferritischen Phase wurde eine kritische Dehnung von 0,5 % angenommen. Wie bereits in *Kapitel 4.2* gezeigt, ergibt sich lokal im Gefüge eine höhere Beanspruchung als sie global erfasst wird. Daher kommt es auch schon vor Erreichen der makroskopischen globalen Dehnung von 0,5 % zu ersten Werkstofftrennungen im Gefüge. Mit zunehmender globaler Beanspruchung des Gefüges initiieren mehrere Risse in der ferritischen Phase, welche bis zum Erreichen der austenitischen Phase fortschreiten. Bereits bei einer globalen Dehnung von 1,12 % ist die gesamte ferritische Phase im Risspfad vollständig getrennt, *Abbildung 4.37b*. Die Risse arretieren zunächst in der austenitischen Phase und initiieren sehr hohe Dehnungen vor den Risspitzen im Austenit. Mit zunehmender globaler Beanspruchung schreiten die Risse langsam durch den Austenit fort und wachsen zusammen, bis das gesamte Modell des Realgefüges bei einer globalen Dehnung von 6,22 % versagt, *Abbildung 4.37c*.

Bei Betrachtung der Dehnungen (*Abbildung 4.37*) ist auffällig, dass im Gefüge des Duplexstahls nur geringe plastische Verformungen vorliegen. Die sehr geringe Dehnung des umliegenden Gefüges resultiert aus der insgesamt geringeren globalen Dehnung bis zum Versagen des Modells. Die höchsten Dehnungen sind entlang der Rissflanken im Austenit auszumachen. Hingegen ist in der ferritischen Phase entlang des Risspfades nahezu keine plastische Verformung des Gefüges erfolgt. Deutlicher zu sehen ist die geringere Verformung des  $\delta$ -Ferrits in *Abbildung 4.38*. Dargestellt sind die äquivalenten plastischen Dehnungen entlang der rechten Flanke des Risspfades für die simulierte duktile (schwarze Kurve) und spröde (blaue Kurve) Werkstofftrennung im Modell des Realgefüges.

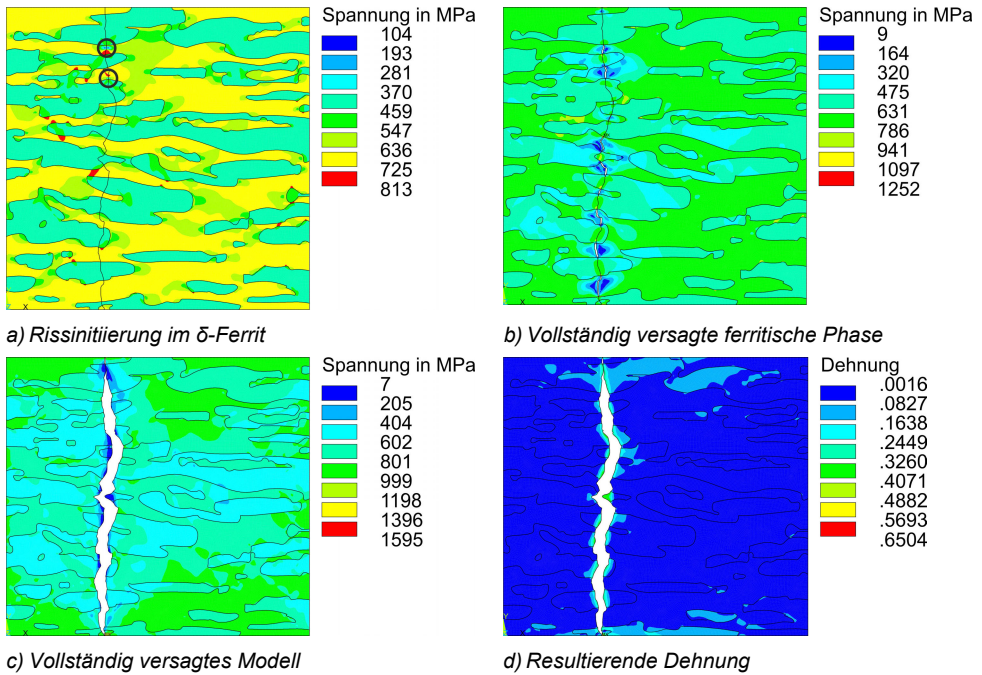


Abbildung 4.37: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei spröder Werkstofftrennung in der ferritischen und duktiler Werkstofftrennung in der austenitischen Phase entlang des Risspfades C2

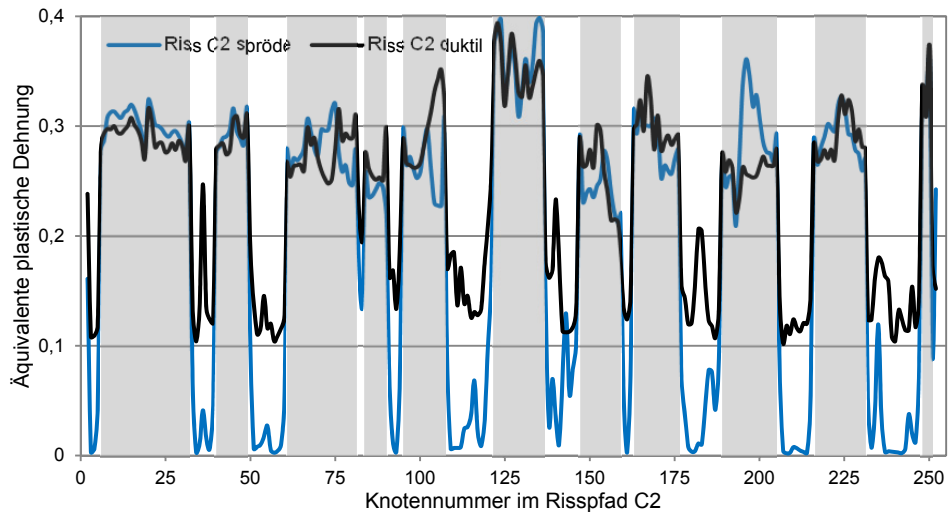
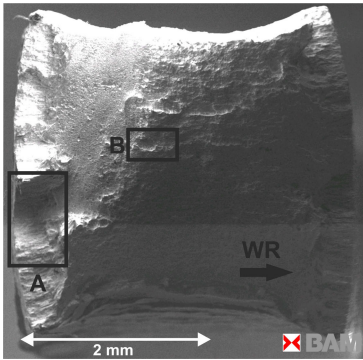


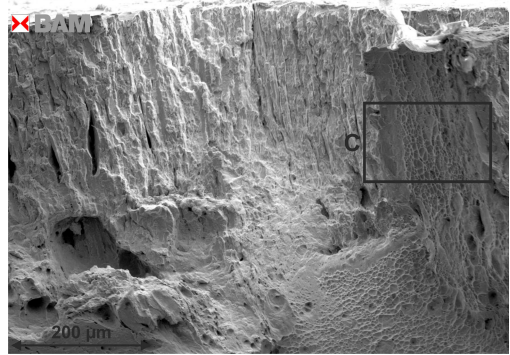
Abbildung 4.38: Vergleich der äquivalenten plastischen Dehnung entlang der rechten Rissflanke im Risspfad C2 für sprödes und duktiler Versagen, austenitische Bereiche sind grau markiert

### Vergleich der Bruchtopographie mit der numerischen Simulation (spröde)

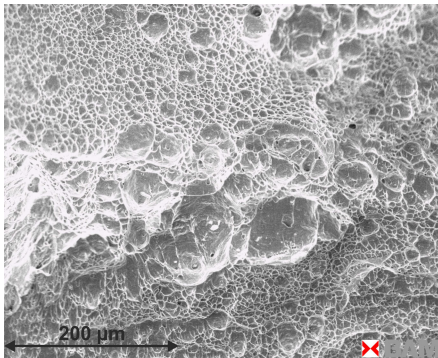
Deutlich zu erkennen ist, dass in der austenitischen Phase (graue Bereiche im Diagramm) entlang des Risspfades nahezu die gleiche plastische Verformung vorliegt. Im Fall des duktilen Versagens sind auch in der ferritischen Phase plastische Dehnungen größer 10 % auszumachen. Hingegen fallen im spröde versagten  $\delta$ -Ferrit die plastischen Dehnungen in diesen Bereichen auf nahezu 0 % ab. Das bedeutet, dass nahezu keine plastische Verformung in der ferritischen Phase erfolgt ist. Daher würde eine fraktographische Analyse der Bruchfläche sehr wahrscheinlich spröde als auch duktile Anteile zeigen. Dies kann auch im Vergleich mit den fraktographischen Aufnahmen aus der Arbeit von Olden et al. [54] (Abbildung 2.23b) sowie der in Kapitel 2.3.3 diskutierten Literatur bestätigt werden. Zum Vergleich sind in *Abbildung 4.39* REM-Aufnahmen von Bruchflächen wasserstoffbeladener Zugproben aus eigenen Untersuchungen dargestellt.



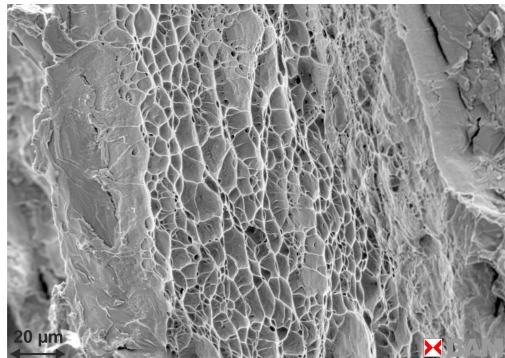
a) Übersicht Bruchfläche



b) Detail A - Spröder Rand mit duktilen Bereichen und Sekundärrissen



c) Detail B - Bereiche ohne Verformung im Probenkern

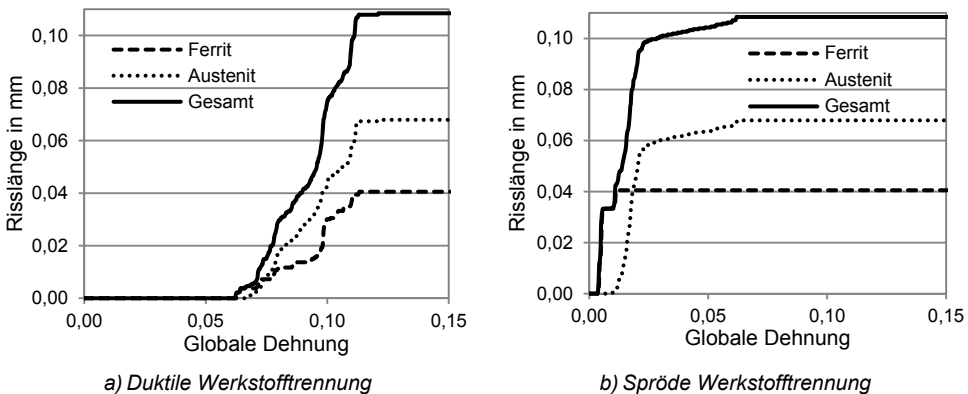


d) Detail C – Duktiler Bereich im spröden Rand

*Abbildung 4.39:* Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme der Bruchfläche einer wasserstoffbeladenen Zugprobe des Duplexstahls X2CrNiMoN22-5-3 (Wst.-Nr.: 1.4462) mit spröden und duktilen Anteilen auf der Bruchfläche

Zu bemerken ist jedoch, dass hier keine vollständige Durchsättigung der Zugprobe vorlag. Die größte Menge an Wasserstoff war im oberflächennahen Bereich situiert, was hier zum makroskopisch spröden Versagen führte. Dennoch sind auch in dem makroskopisch spröden Randbereichen duktile Flächen auszumachen, *Abbildung 4.39d*. Im Kern der Zugprobe hingegen lagen geringere Wasserstoffkonzentrationen vor und der Einfluss von Wasserstoff ist weniger deutlich. Dennoch sind auch hier spröde Flächen bzw. Bereich ohne sichtbare Verformung innerhalb der überwiegend duktilen Bruchfläche zu sehen, *Abbildung 4.39c*. Weitere Erläuterungen zu den experimentellen Ergebnissen sind im *Kapitel 4.4* gegeben.

In *Abbildung 4.40* sind die Risslängen in Abhängigkeit der globalen Dehnung des Modells des Realgefüges für beide Versagensfälle gegenübergestellt. Im Vergleich der beiden simulierten Versagensfälle ist erkennbar, dass die Werkstofftrennung im  $\delta$ -Ferrit im Fall des spröden Versagens *Abbildung 4.40b*, zeitlich schneller und innerhalb eines geringeren Beanspruchungsintervalls erfolgt als für das simulierte duktile Versagen. Aber auch der Austenit versagt im Fall der spröden ferritischen Phase, infolge der hohen induzierten Dehnungen an den Rissspitzen, schneller. Das führt makroskopisch zu einem frühen Versagen des Modells des Realgefüges und kann mit einer spröden Werkstofftrennung assoziiert werden. Eindeutig ist auch für den spröden Versagensfall festzustellen, dass erst die gesamte ferritische Phase innerhalb des Risspfades versagt, bevor es auch in der austenitischen Phase zu einer Werkstofftrennung kommt. Diese Arretierung der Risse im Austenit wird auch häufig in Untersuchungen zur wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung in Duplexstählen beobachtet [15, 110, 185, 186]. Im Fall des duktilen Versagens beider Phasen ist erkennbar, dass die Risse in beiden Phasen ähnlich schnell fortschreiten und beide Phasen nahezu gleichzeitig vollständig versagen. Auch hier haben die bereits entstandenen Risse eine hohe Kerbwirkung und beschleunigen den weiteren Rissfortschritt.



*Abbildung 4.40: Vergleich der Risslängen in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit der globalen Dehnung des Realgefügemodells im Risspfad C2 für a) duktile Werkstofftrennung in beiden Phasen und b) spröde Werkstofftrennung im  $\delta$ -Ferrit und duktile Werkstofftrennung im Austenit*

Die Ergebnisse zeigen, dass die Werkstofftrennung in beiden Versagensfällen zuerst in der ferritischen Phase aufgrund der höheren Empfindlichkeit der ferritischen Phase gegenüber einer Degradation der mechanischen Eigenschaften initiiert wird. Die resultierende Verformung auf den Rissoberflächen ist sehr gut mit experimentell ermittelten Bruchtopographien

vergleichbar. Es lassen sich mit dem numerischen Modell qualitative Aussagen zu möglichen Versagensszenarien und zugehörige Bruchtopographien treffen. Im Vergleich beider Versagensfälle zeigt sich eine zeitlich schnellere Werkstofftrennung, innerhalb eines kleineren Beanspruchungsintervalls für die Simulation des spröden Versagens. Makroskopisch äußert sich dieses Verhalten in einem fast schlagartigen Versagen der Probe bei geringer makroskopischer Dehnung. Im Fall der spröden Werkstofftrennung ließ sich auch im Modell des Realgefüges die Arretierung der Risse im Austenit feststellen, wie es auch in experimentellen Untersuchungen häufig beobachtet werden kann. Im Fall des duktilen Versagens hat sich gezeigt, dass das Modell des Realgefüges unter den für die Simulation angenommenen Bedingungen bereits vor Erreichen der makroskopischen Dehnung bei Zugfestigkeit versagt hat. Daher ist zu vermuten, dass sich das reale Gefüge im duktilen Versagen anders verhält bzw. weitere Faktoren auf das mechanische Verhalten einwirken. Dennoch erlaubt die Simulation mit dem Modell des Realgefüges qualitative Aussagen zum mechanischen Verhalten des Duplexstahls. Zudem ist für einen Schadensfall unter Einfluss von Wasserstoff eher der spröde Versagensfall anzunehmen. Dieser lässt sich mit dem Modell des Realgefüges sehr gut mikroskopisch als auch makroskopisch bzw. global abbilden. Dennoch sollte für zukünftige numerische Simulationen versucht werden, das mechanische Verhalten und Versagenskriterien experimentell genauer zu quantifizieren, um die Mechanismen einer solchen Werkstoffschädigung besser zu verstehen. Die numerischen Methoden unter Nutzung solcher Modelle realer Gefüge können dabei einen praktischen Beitrag leisten. Zudem sollten die Modelle erweitert werden, um alle auf das mechanische Verhalten der Phasen wirkenden Faktoren, z.B. Kristalltextur oder orthotrope mechanische Eigenschaften, berücksichtigen zu können. Auch ist die Erweiterung des Modells auf eine dreidimensionale Abbildung des Gefüges möglicherweise hilfreich, da sich somit die makroskopische Anisotropie der mechanischen Eigenschaften sowie die „load sharing“ Effekte der Phasen besser abbilden ließen.

#### 4.3.2.2 Werkstofftrennung in mehreren Risspfaden

Im realen Gefüge des Duplexstahls sind jedoch einzelne Risse in den Phasen unter Einfluss von Wasserstoff eher selten zu beobachten. Experimentelle Ergebnisse zeigen, dass unter Wasserstoffeinfluss zumeist mehrere Risse in der ferritischen Phase initiieren, *Kapitel 2.3.3*. Auch die numerischen Vorbetrachtungen haben gezeigt, dass mehrere Risse im Gefüge initiiert werden. Wie schon für den einzelnen Riss zu beobachten war, kommt es im umliegenden Gefüge zu einer Entlastung. Dadurch würden sich die Risse auch gegenseitig im Rissfortschritt beeinflussen. Um zu ermitteln, inwieweit eine Beeinflussung der Risse untereinander erfolgt und wie sich dies auf den Rissfortschritt auswirkt, wurden numerische Simulationen unter Nutzung mehrerer Risspfade durchgeführt. Nachfolgend werden die Ergebnisse der Simulationen mit vier vordefinierten Risspfaden im Modell des Realgefüges beschrieben. Simuliert wurden in diesem Fall neben den zwei Grenzfällen sprödes und duktilen Versagen auch Werkstofftrennungen unter Nutzung von Kriterien, die zwischen den Grenzfällen liegen. Somit lassen sich zusätzlich Aussagen zu Werkstofftrennungen bei niedrigeren Wasserstoffkonzentrationen in der ferritischen Phase tätigen. Zunächst soll aber näher auf die beiden Grenzfälle der Werkstofftrennung eingegangen werden. Dazu sind in *Abbildung 4.41* die Vergleichsspannungen und -dehnungen für den duktilen Versagensfall und in *Abbildung 4.42* für den spröden Versagensfall zu verschiedenen Zeitpunkten des Rissfortschrittes dargestellt.

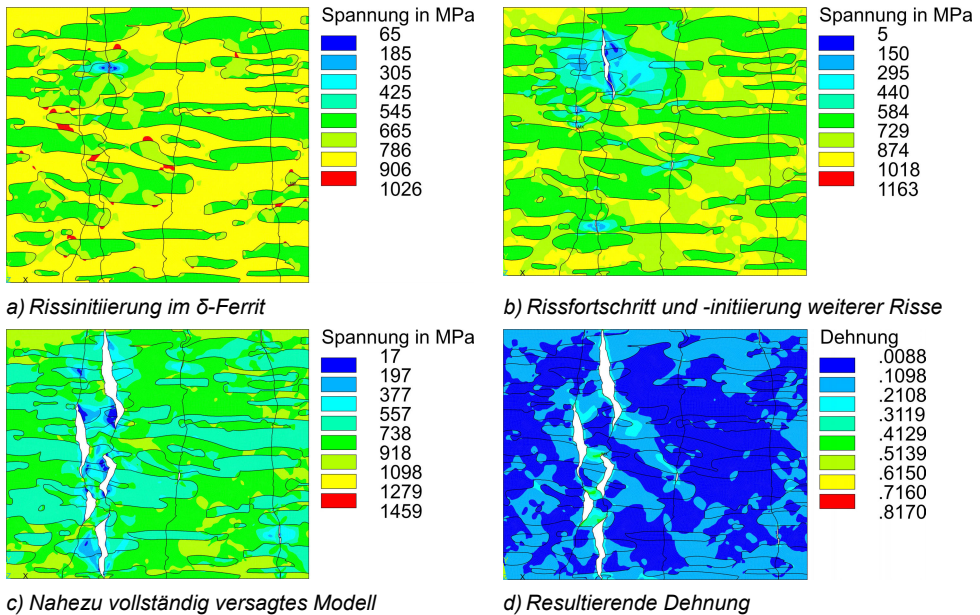


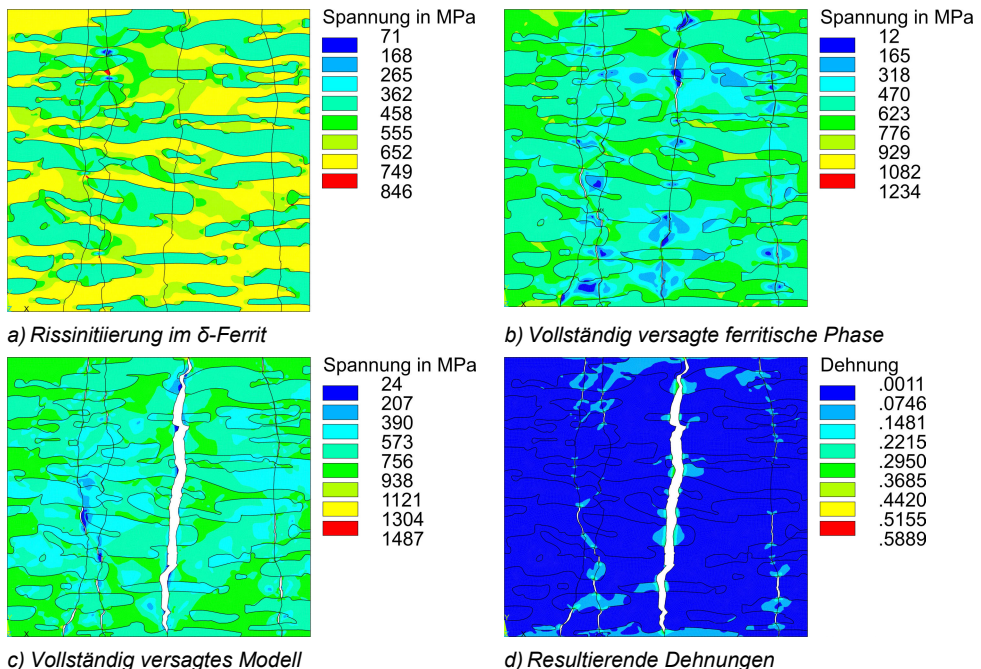
Abbildung 4.41: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei duktiler Werkstofftrennung

Wie der *Abbildung 4.41a* zu entnehmen ist, initiiert der erste Riss in der ferritischen Phase des Duplexstahls am gleichen Ort und im selben Risspfad wie für die Simulation mit nur einem Risspfad. Auch hier initiiert der Riss bei einer globalen Dehnung von circa 6 %. Mit zunehmender Beanspruchung wird ein zweiter Riss im gleichen Risspfad oberhalb des ersten Risses initiiert. Beide Risse wachsen mit zunehmender Beanspruchung durch den Austenit hindurch zusammen. Gleichzeitig initiieren auch zusätzlich Risse in der ferritischen Phase in den anderen Risspfaden, *Abbildung 4.41b*. Mit zunehmender Beanspruchung schreiten alle initiierten Risse weiter fort, wobei vornehmlich die Risse im ersten (C1) und zweiten Risspfad (C2) zur gesamten Werkstofftrennung beitragen, *Abbildung 4.41c*. Beide Risspfade, C1 und C2, liegen in Bereichen des Gefüges, die in der numerischen Voruntersuchung sehr starke Anhäufungen versagter Bereiche zeigten. Im Vergleich mit den Spannungen und Dehnungen im Gefüge ist in diesem Bereich die höchste Beanspruchung auszumachen. Zudem liegen die Risse sehr nah beieinander, was auch zu einer starken Beeinflussung der Werkstofftrennung in beiden Risspfaden führt. Die Werkstofftrennung im zweiten Risspfad führt zur Entlastung des Gefüges, auch innerhalb des ersten Risspfades und umgekehrt. Dadurch kommt es zu keinem weiteren Rissfortschritt in den entlasteten Bereichen. Hier zeigt sich deutlich die gegenseitige Beeinflussung mehrerer Risse im Gefüge. Dadurch wird eine Werkstofftrennung erst mit zunehmender globaler Belastung möglich. Aufgrund sehr hoher Verformungen einzelner Elemente in den rissspitzennahen Bereichen ist die Simulation aber bei einer globalen Dehnung von circa 14 % abgebrochen und eine Werkstofftrennung des gesamten Modells des Realgefüges ist nicht erfolgt. Alle Risse wurden in der austenitischen Phase arretiert. Zwischen den Risspitzen im Austenit sind daher auch sehr hohe Dehnungen im Gefüge zu beobachten, *Abbildung 4.41d*. Im realen Versagensfall wären die einzelnen Risse der beiden Risspfade mit sehr hoher Wahr-

scheinlichkeit durch die austenitische Phase hindurch entlang der Bereiche hoher Dehnungen zusammengewachsen und hätten zum Versagen des Duplexwerkstoffes geführt. Ein Zusammenwachsen von Rissen in verschiedenen Risspfaden wurde für die Simulation jedoch nicht vorgesehen. Daher bleibt der Nachweis hier offen.

Die Betrachtung der resultierenden Dehnungen zeigt, dass innerhalb des Gefüges hohe plastische Verformung in beiden Phasen erfolgt. Die höchsten Verformungen entstehen im Bereich des ersten und zweiten Risspfades innerhalb der austenitischen Phase, zwischen den Risspitzen der einzelnen Risse. In diesem Fall würde eine fraktographische Analyse der Bruchfläche einen duktilen Riss zeigen, siehe *Abbildung 4.36*. Zudem lassen sich neben dem „primären Riss“ auch weitere Risse innerhalb der ferritischen Phase lokalisieren. Diese sind aufgrund der Entlastung des Gefüges durch die primären Risse nicht weiter fortgeschritten und sind zumeist im Austenit arretiert.

Für den zweiten angenommenen Grenzfall, sprödes Versagen der ferritischen Phase und duktilen Versagen der austenitischen Phase ist zu sehen, dass die Orte der ersten Rissinitiation gleich sind mit denen der Simulation mit nur einem Risspfad. Auch hier initiieren gleichzeitig zwei Risse in der ferritischen Phase des zweiten Risspfades, *Abbildung 4.42a*. Die weitere Werkstofftrennung mit zunehmender Beanspruchung des Gefüges verläuft jedoch abweichend. Mit zunehmender Beanspruchung initiieren mehrere Risse nahezu in der gesamten ferritischen Phase in allen Risspfaden, *Abbildung 4.42b*. Bedingt durch die Lage des dritten Risspfades erfolgt die gesamte Werkstofftrennung in diesem Bereich des Modells, *Abbildung 4.42c*.



*Abbildung 4.42: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei spröder Werkstofftrennung*

Grund dafür ist der höhere Anteil ferritische Phase in diesem Risspfad. Hier kommt es in größeren Bereichen bereits zu einer vollständigen Trennung im  $\delta$ -Ferrit und die beiden Modellhälften sind nur noch über die verbleibenden austenitischen Brücken miteinander verbunden. Bedingt durch die Kerbwirkung der arretierten Risse und der zunehmenden Beanspruchung, welche nur noch über die schmalen austenitischen Bereiche übertragen wird, kommt es zum schnellen Versagen des Austenits.

Insgesamt erfolgt die komplette Werkstofftrennung im Modell des Realgefüges bei einer globalen Dehnung von circa 3,4 %. In der vorangegangenen numerischen Simulation der spröden Werkstofftrennung in einem Risspfad wurde eine globale Dehnung von circa 6,2 % erreicht. Die geringere erreichte globale Dehnung in der Simulation mit mehreren Risspfaden resultiert aus den größeren ferritischen Bereichen, die im Risspfad C3 Berücksichtigung finden.

Für die resultierenden Dehnungen ergibt sich ein ähnliches Bild, wie es auch für die spröde Werkstofftrennung mit einem Riss festgestellt werden konnte. Im gesamten Gefüge des Duplexstahls ist nahezu keine plastische Verformung erfolgt. Auch in diesem Versagensfall sind die höchsten Dehnungen entlang der Risspfade in der austenitischen Phase zu beobachten. Daher würde eine fraktographische Analyse der Bruchoberfläche duktile als auch spröde Areale zeigen, siehe *Abbildung 4.39*. Eine vergleichende Darstellung der äquivalenten plastischen Dehnungen entlang der Rissflanken der beiden Versagensfälle ist in diesem Fall schwieriger, da die Werkstofftrennung in unterschiedlichen Risspfaden erfolgte. Jedoch zeigt sich auch hier ein ähnliches Bild, wie für die Simulationen der Werkstofftrennung in einem Risspfad. Die resultierenden Risslängen in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit von der globalen Dehnung sind vergleichend in *Abbildung 4.43* gegenüber gestellt. Ersichtlich ist, dass der Rissfortschritt im Fall der duktilen Werkstofftrennung in beiden Phasen sehr gleichmäßig verläuft. Bedingt durch die insgesamt höhere Beanspruchung des Gefüges findet kurz nach der Rissinitiierung in der ferritischen Phase auch eine Werkstofftrennung in der austenitischen Phase statt. Da in den Risspfaden C1 und C2 ein höherer Anteil an austenitischer Phase berücksichtigt wird, ist die Risslänge in diesem Fall etwas höher als im  $\delta$ -Ferrit.

Im Fall des spröden Versagens der ferritischen Phase ist zu erkennen, dass zunächst nahezu die gesamte ferritische Phase in den Risspfaden versagt, bevor es auch zu einer zunehmenden Werkstofftrennung in der austenitischen Phase kommt und die Risslänge zunimmt. Zunächst versagt der Austenit in Bereichen die von größeren ferritischen Arealen umschlossen sind, da hier bereits eine Werkstofftrennung erfolgte und die Kerbwirkung an den Risspitzen sehr hoch ist. Daher auch der schnellere Anstieg der Risslänge im Austenit unterhalb einer globalen Dehnung von 5 %. Bereits hier ist die vollständige Trennung des Modells entlang des Risspfades C3 eingetreten.

Der nachfolgende Anstieg der Risslänge in der austenitischen Phase resultiert aus der weiter steigenden Beanspruchung. Trotz der vollständigen Trennung im Risspfad bleiben die beiden Hälften des Modells miteinander verbunden. Zum einen über die Feder-Dämpfer-Elemente im Risspfad und zum anderen über die Knoten am oberen und unteren Ende des Risspfades. Durch die Übertragung der makroskopischen Verschiebung aus der Zugprobe auf die Randknoten des Modells des Realgefüges wird bei der Berechnung der Verschiebung der Randknoten in Abhängigkeit der Knotenposition für die jeweils koinziden-



ten Knoten am oberen und unteren Rand des Modells die gleiche Verschiebung in x- und y-Richtung aufgeprägt. Dadurch ist eine Trennung im Risspfad am oberen und unteren Ende des Risspfades nicht möglich. Dennoch kann hier von einer vollständigen Trennung des Gefüges ausgegangen werden.

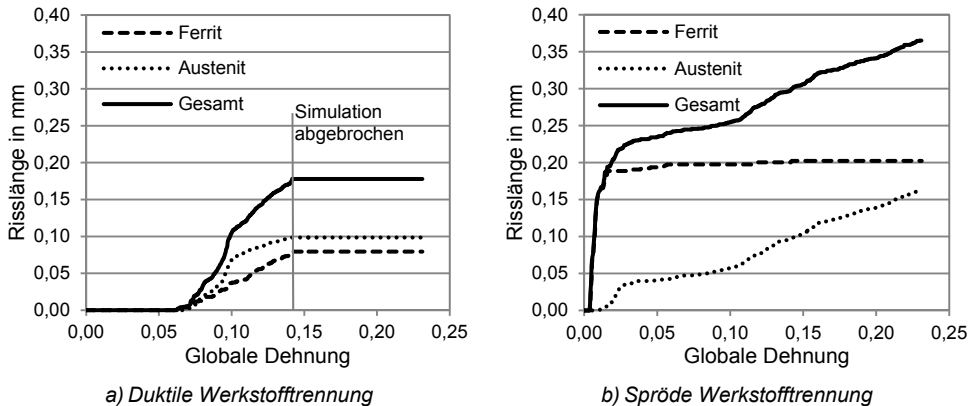
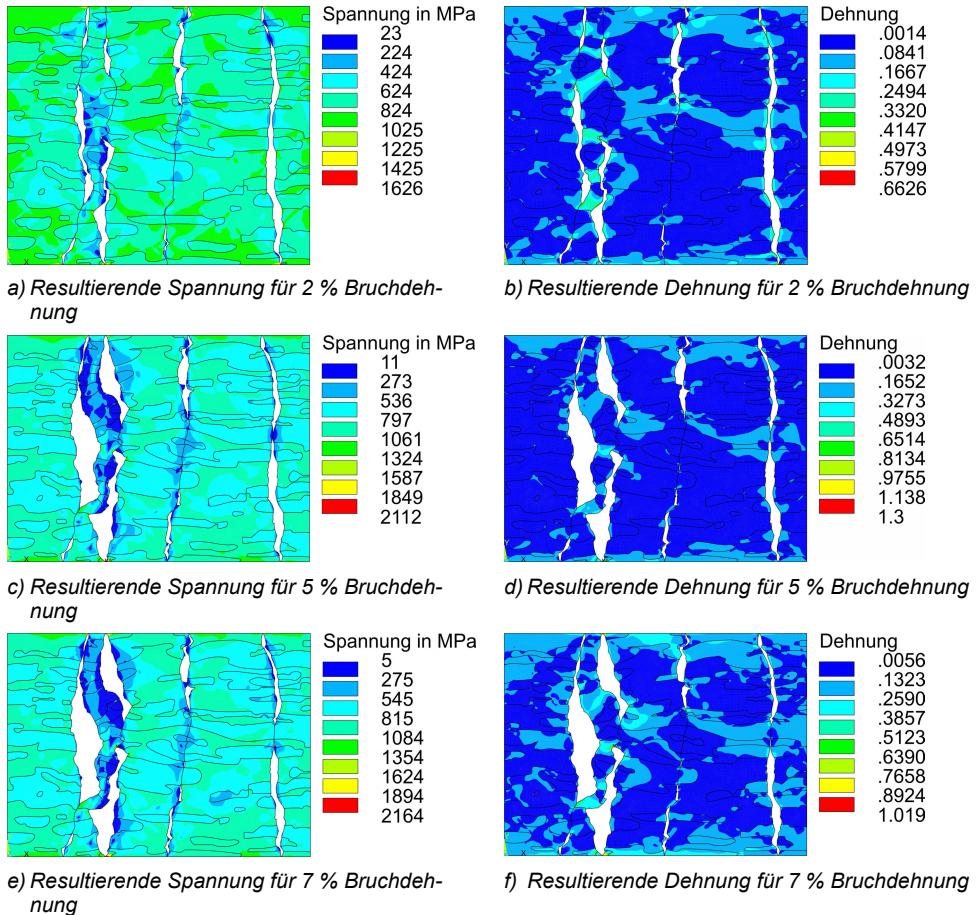


Abbildung 4.43: Vergleich der Risslängen in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit der globalen Dehnung des Modells des Realgefüges für a) duktile Werkstofftrennung in beiden Phasen und b) spröde Werkstofftrennung im  $\delta$ -Ferrit und duktile Werkstofftrennung im Austenit

Nachfolgend werden kurz die Ergebnisse der simulierten Versagensfälle mit Kriterien zwischen den Grenzfällen zusammenfassend dargestellt. Für die Simulation der Werkstofftrennung wurden die Versagenskriterien der ferritischen Phase zwischen 0,5 % und 11 % Bruchdehnung variiert, um die Wirkung geringerer Wasserstoffkonzentrationen im Duplexgefüge nachzustellen. Simuliert wurde mit den Versagenskriterien 2 %, 5 % und 7 % Bruchdehnung in der ferritischen Phase. In *Abbildung 4.44* sind die entsprechenden wahren Vergleichsspannungen und -dehnungen nach von Mises in den Phasen jeweils für den Zustand der vollständigen Trennung bzw. nach Erreichen der maximalen Verschiebung im Modell des Realgefüges gezeigt.

In *Abbildung 4.44a* und *Abbildung 4.44b* sind die resultierenden Spannungen und Dehnungen nach vollständiger Trennung des Modells für eine angenommene Bruchdehnung in der ferritischen Phase von 2 % dargestellt. Der erste Riss initiiert im Risspfad C2 im selben Bereich der schmalen taillierten ferritischen Phase wie auch für die anderen simulierten Versagensfälle. Bei Rissinitiation betrug die globale Dehnung des Modells 1,4 %. Das Modell des Realgefüges versagte vollständig im Risspfad C4 bei einer globalen Dehnung von 11,7 %. Mit abnehmenden Wasserstoffkonzentrationen, d.h., zunehmende ertragbare Dehnung, verschiebt sich die Rissinitiation zu höheren globalen Dehnungen. Im Fall einer angenommenen Bruchdehnung von 5 % für ein Versagen in der ferritischen Phase kommt es bei einer globalen Dehnung von 2,7 % zur Rissinitiation. Für eine Bruchdehnung von 7 % werden 3,9 % globale Dehnung erreicht, bevor ein Riss initiiert. In beiden Fällen initiiert der erste Riss am gleichen Ort im Modell des Realgefüges wie in allen bisherigen Simulationen der Werkstofftrennung. Für die Bruchdehnung von 5 % zeigt sich noch vor Erreichen der maximalen Verschiebung bei einer globalen Dehnung von 21,4 % eine vollständige Trennung im Modell, *Abbildung 4.44c* und *d*. Im Fall der Bruchdehnung von 7 % kommt es vor Ende der numerischen Simulation nicht mehr zu einer vollständigen Trennung. Mit sehr

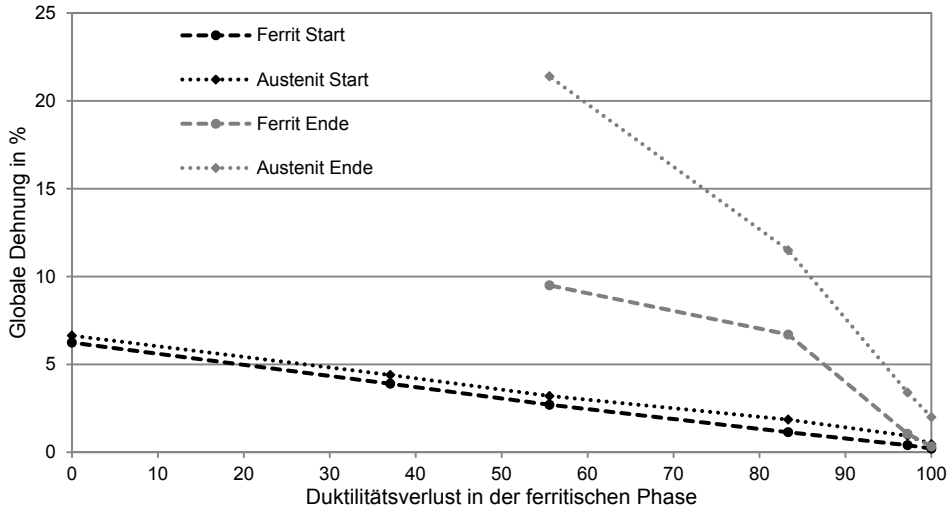
hoher Wahrscheinlichkeit wäre aber auch hier eine vollständige Trennung des Modells erfolgt, *Abbildung 4.44e* und *Abbildung 4.44f*.



*Abbildung 4.44: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge, nach vollständiger Werkstofftrennung bzw. Simulationsende für die Bruchkriterien 2 % (a, b), 5 % (c, d) und 7 % (e, f)*

Im Vergleich der in *Abbildung 4.44* dargestellten Versagensfälle mit den beiden zuvor gezeigten Grenzfällen ist zu erkennen, dass mit abnehmenden Wasserstoffkonzentrationen, d.h., zunehmender Bruchdehnung, die globale Dehnung bis zum vollständigen Versagen des Modells steigt. Für den duktilen Fall und bei 7 % Bruchdehnung der ferritischen Phase wird keine vollständige Werkstofftrennung bis zum Erreichen der makroskopischen Dehnung bei Zugfestigkeit simuliert. Hier sind höhere Dehnungen für ein vollständiges Versagen notwendig. Mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit hätte eine Zugprobe in diesen Fällen eine deutliche Einschnürung vor dem Versagen gezeigt. Ersichtlich ist auch die Zunahme der Dehnung im umliegenden Gefüge mit abnehmender Versprödung der ferritischen Phase.

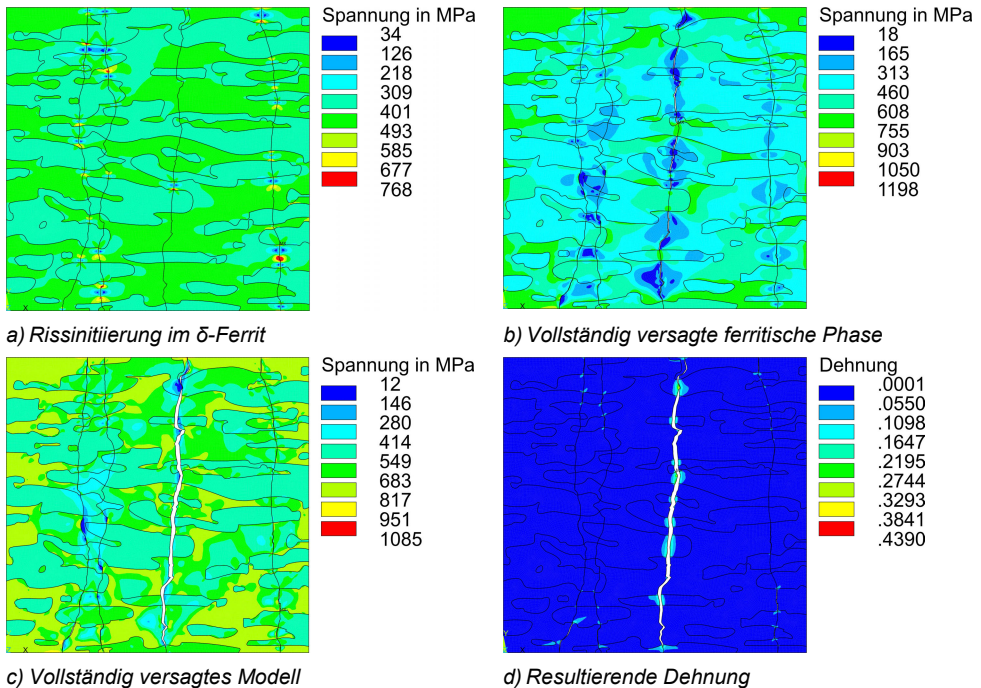
Zur Übersicht sind in *Abbildung 4.45* die erreichten globalen Dehnungen im Modell des Realgefüges zu Beginn der Rissinitiierung (Start) und nach vollständiger Trennung (Ende) des Modells für die austenitische und ferritische Phase des Duplexstahls in Abhängigkeit vom angenommenen Duktilitätsabfall in der ferritischen Phase dargestellt. Ein Duktilitätsabfall von 100 % bedeutet Zusammenfall von Zugfestigkeit und 0,2 % Dehngrenze in der ferritischen Phase, wobei in diesem Fall auch ein Duktilitätsabfall in der austenitischen Phase angenommen wurde. Der Fall 100 % Duktilitätsverlust wird nachfolgend noch erläutert. Ein Duktilitätsabfall von 0 % bedeutet, dass in beiden Phasen die Dehnung bei Zugfestigkeit der jeweiligen Phase erreicht wird.



*Abbildung 4.45: Erreichte globale Dehnung in der austenitischen und ferritischen Phase bei Rissinitiierung (Start) und vollständiger Trennung (Ende) in Abhängigkeit des angenommenen Duktilitätsverlustes in der ferritischen Phase*

Zu sehen ist, dass kurz nach der Initiierung eines Risses im  $\delta$ -Ferrit auch im Austenit eine Rissbildung auftritt, unabhängig ob sprödes oder duktiles Versagen der ferritischen Phase angenommen wird. Mit zunehmendem Duktilitätsverlust in der ferritischen Phase reduziert sich auch die Dehnung bis zum Erreichen der vollständigen Trennung des Modells. Für den duktilen Versagensfall und den Fall einer Bruchdehnung von 7 % im Ferrit ließ sich die Dehnung bei vollständiger Trennung des numerischen Modells nicht ermitteln, da die Simulation vorher beendet bzw. abgebrochen war. Dennoch ist der Trend zu einem größeren Dehnungsintervall zwischen Rissinitiierung und vollständiger Trennung gut zu erkennen. Mit zunehmender Versprödung der ferritischen Phase nimmt auch die maximal erreichte globale Dehnung bis zur vollständigen Werkstofftrennung ab. Das bedeutet, dass allein durch die Duktilitätsabnahme in der ferritischen Phase ein makroskopisch sprödes Versagen auftritt. Das numerische Modell lässt also qualitative Aussagen zum Werkstoffversagen unter Einfluss von Wasserstoff zu.

Als zusätzliches Szenario einer möglichen Werkstofftrennung wurde angenommen, dass im Duplexgefüge ausreichend hohe Wasserstoffkonzentrationen vorliegen, um auch die mechanischen Eigenschaften in der austenitischen Phase herabzusetzen. Dazu wurde für die Simulation der Werkstofftrennung in der ferritischen Phase eine Bruchdehnung von 0,2 % und für die austenitische Phase von 15 % verwendet. In *Abbildung 4.46* sind die entsprechenden wahren Vergleichsspannungen und -dehnungen nach von Mises im Modell des Realgefüges zu verschiedenen Zeitpunkten des Rissfortschrittes dargestellt. In diesem Fall kommt es schon bei einer globalen Dehnung von 0,2 % zu einer Risseinleitung in der ferritischen Phase, wobei innerhalb der Risspfade gleich mehrere Risse im  $\delta$ -Ferrit initiieren, *Abbildung 4.46a*. Mit nur minimal zunehmender globaler Belastung versagt die gesamte ferritische Phase innerhalb der Risspfade bei einer globalen Dehnung von circa 0,42 %, und die Risse arretieren zunächst im Austenit, *Abbildung 4.46b*. Bedingt durch die herabgesetzten mechanischen Eigenschaften in der austenitischen Phase kommt es unter minimaler Zunahme der globalen Belastung, bei einer globalen Dehnung von circa 2 %, zum vollständigen Versagen des Modells, *Abbildung 4.46c*. Bei Betrachtung der resultierenden Dehnungen (*Abbildung 4.46d*) zeigt sich ein ähnliches Bild wie für den Fall des spröden Versagens in der ferritischen Phase, vergleiche *Abbildung 4.42d*. Insgesamt ist die plastische Verformung im Gefüge aber auch in der austenitischen Phase entlang des Risspfades geringer.



*Abbildung 4.46: Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge, bei Wirkung hoher Wasserstoffkonzentrationen*

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass unabhängig von der Anzahl der Risspfade im Modell des Realgefüges oder dem angenommenen Versagenskriterium die Risse im gleichen Bereich des Gefüges innerhalb desselben Risspfades initiieren. Daher kann hier bestätigt werden, dass schmale taillierte Bereiche in der ferritischen Phase, welche von größeren austenitischen Inseln umgeben und längs zur Belastungsrichtung orientiert sind, risskritische Bereiche im Gefüge darstellen. Im Vergleich der Simulation unter Nutzung eines einzelnen Risspfades und der Simulation mit mehreren Risspfaden im Gefüge sind deutliche Unterschiede für die spröde Werkstofftrennung zu erkennen. In diesem Fall sind Bereiche mit hohen ferritischen Anteilen besonders kritisch. Im Versagensfall treten hier große Werkstofftrennungen im Gefüge auf und die restlichen austenitischen Areale versagen durch eine hohe Beanspruchung schneller. Zudem besteht hier auch die Möglichkeit der Akkumulation hoher Wasserstoffkonzentrationen, da der Wasserstofftransport im Duplexgefüge primär über die ferritische Phase erfolgt.

Die Ergebnisse der numerischen Simulation zeigen, dass die vorgestellten numerischen Herangehensweisen eine Werkstofftrennung unter Einfluss von Wasserstoff qualitativ sehr gut abbilden können. Zudem lässt sich mit der verwendeten „node-release“ Technik die Kerbwirkung der scharfen Rissspitzen in der austenitischen Phase berücksichtigen. Die EET-Technik bietet den Vorteil der Simulation einer Werkstofftrennung unabhängig von vordefinierten Risspfaden. Somit lassen sich risskritische Bereiche im Gefüge ermitteln. Jedoch wird im Fall des spröden Versagens die starke Kerbwirkung der bereits initiierten Risse im Gefüge nicht so effektiv berücksichtigt wie bei der „node-release“ Technik. Dennoch sollten beide Methoden zur Simulation der Werkstofftrennungen genutzt werden, um qualitative Aussagen zum möglichen Rissverlauf tätigen zu können. Mit beiden Techniken lässt sich die Beanspruchung in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit der makroskopischen Belastung ermitteln. Somit ist die Übertragbarkeit von Ergebnissen zwischen der Mesoebene und dem makroskopischen Verhalten des Duplexstahls gewährleistet. Folglich kann durch die Simulation der Werkstofftrennung, des Wasserstofftransports und der Phasenspannungen und -dehnungen ein nützlicher Beitrag zum Verständnis der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in Duplexstählen geleistet werden. Auch lassen sich durch die Übertragbarkeit der Ergebnisse Experimente besser erklären und gegebenenfalls auch optimieren.

### 4.4 Begleitende Experimente

Während der Durchführung der Simulationen dieser Arbeit ergab sich die Möglichkeit, an einer Messzeit an der Beamline EDDI am HZB Berlin zu partizipieren. Es ergab sich die Möglichkeit das phasenspezifische mechanische Verhalten unter Einfluss von Wasserstoff in-situ während eines Zugversuches zu untersuchen. Aufgrund der kurzen Vorbereitungszeit konnte eine ausführliche Studie zur Wasserstoffbeladung des Duplexstahls nicht erfolgen. Durch die zeitliche Nähe zur Messzeit erfolgte nur eine kurzzeitige Beladung von 72 Stunden mit dem Ziel, eine homogene Wasserstoffkonzentration zumindest in der ferritischen Phase einzustellen. Nach Abschluss der Versuchsreihe zeigte sich jedoch, dass die Proben nur zum Teil durchgesättigt wurden, wie nachfolgend noch dargestellt. Dennoch zeigte sich für die wasserstoffbeladenen Zugproben ein anderes mechanisches Verhalten als für die wasserstofffreien Zugproben. An die in-situ Beugungsexperimente anknüpfend wurden erneut (ex-situ) Zugversuche mit wasserstoffbeladenen Proben durchgeführt. Die Proben wurden für 96 Stunden bei unterschiedlichen Stromdichten beladen. Ziel war es, eine höhere Wasserstoffkonzentrationen bzw. eine homogenere Verteilung des Wasserstoffs in der ferritischen Phase zu erreichen, um die schädigende Wirkung des Wasserstoffs deutlicher herauszustellen. Nachfolgend soll kurz auf die Ergebnisse der ex-situ und in-situ Zugversuche eingegangen werden. Zeitlich fanden die ex-situ Versuche zwar nach den in-situ Versuchen statt, für einen Vergleich bietet es sich jedoch an, zuerst die Ergebnisse der ex-situ Versuche zu betrachten.

#### 4.4.1 Einfluss der Lagerung in Flüssigstickstoff auf die Eigenspannungen

Zur Vermeidung einer Wasserstoffeffusion während der Zeit bis zur Durchführung der Zugversuche wurden die Zugproben in flüssigem Stickstoff gelagert. Wie der Literatur zu entnehmen ist, liegen im Duplexgefüge bereits aus der Herstellung thermisch bedingte Eigenspannungen in den Phasen vor. Um zu überprüfen, ob sich die Eigenspannungen in den Phasen durch die Lagerung bei  $-196\text{ °C}$  verändern, wurden die Eigenspannungen in drei dünnen Proben ( $10\text{ mm} \times 10\text{ mm} \times 0,2\text{ mm}$ ) vor und nach der Lagerung in Flüssigstickstoff ermittelt. Die Ergebnisse der Eigenspannungsmessung sind in *Abbildung 4.47* dargestellt.

Es ist zu sehen, dass die Eigenspannungen vor und nach der Lagerung in Flüssigstickstoff innerhalb der Streuung keine Unterschiede zeigen. Auch die Auswertung der zugehörigen Halbwertsbreiten der aufgenommenen Beugungsspektren zeigte keine Veränderung. Die Halbwertsbreite gibt Auskunft über die Dichte von Gitterdefekten wie Versetzungen [230]. Tritt eine plastische Verformung im Gefüge auf, so entstehen zum Teil neue Versetzungen und die Halbwertsbreite ändert sich. Daher ist davon auszugehen, dass die Lagerung in Flüssigstickstoff in diesem Fall keinen Einfluss auf die Eigenspannungen im Gefüge hat.

Aus *Abbildung 4.47* ist auch zu entnehmen, dass die Höhe der Eigenspannungen in beiden Phasen, in Längs- ( $\sigma_{11}-\sigma_{33}$ ) als auch in Querrichtung ( $\sigma_{22}-\sigma_{33}$ ) im Mittel circa  $500\text{ MPa}$  betragen. Die Eigenspannungsmessung korreliert sehr gut mit den Ergebnissen von Harjo et al. [56], die in einem vergleichbaren Duplexstahl ähnliche Eigenspannungsverteilungen feststellten. Für die in dieser Arbeit erfolgten Messungen wurde von einem ebenen Spannungszustand ausgegangen ( $\sigma_{33} = 0$ ). Jedoch zeigen Harjo et al. [56], dass die Spannungen in Dickenrichtung für eine eindeutige Bestimmung des Spannungszustandes gerade in

zweiphasigen Gefügen nicht zu vernachlässigen sind. Allerdings ist in diesem Fall anzunehmen, dass aufgrund der geringen Dicken der Proben von 0,2 mm und der oberflächen-nahen Messung ein ebener Spannungszustand vorlag und  $\sigma_{33}$  nahezu Null ist.

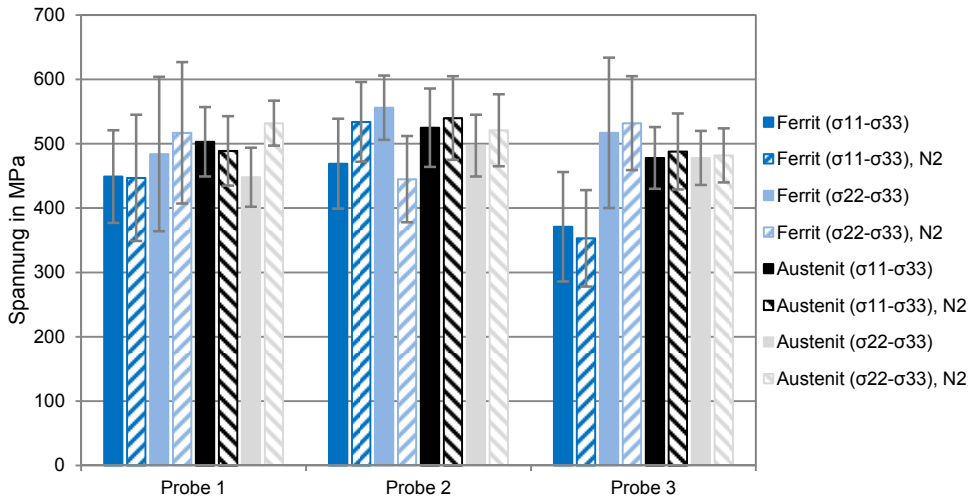


Abbildung 4.47: Vergleich der Eigenspannungen ( $\sigma_{11}-\sigma_{33}$ ) und ( $\sigma_{22}-\sigma_{33}$ ) in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls vor und nach der Lagerung in Flüssigstickstoff

#### 4.4.2 Ergebnisse der Zugversuche

Die Durchführung der Zugversuche erfolgte in der Abteilung 9.1 „Betriebsfestigkeit und Bauteilsicherheit“ der BAM. Vor Prüfbeginn wurden die in Flüssigstickstoff gelagerten Proben kurz in Alkohol aufgetaut und ein taktiler Dehnungsaufnehmer angebracht. Die Probe wurde bis zum Versagen belastet und anschließend eine der Probenhälften wieder in Flüssigstickstoff eingelagert. Von dieser Probenhälfte wurde der Zugprobenkopf entfernt und der verbleibende Messbereich zur Bestimmung der Wasserstoffkonzentration genutzt. Die zweite Probenhälfte diente der Charakterisierung der Bruchtopographie im Rasterelektronenmikroskop (REM). In *Tabelle 4.1* sind die ermittelten mechanischen Kennwerte der wasserstofffreien und -beladenen Zugproben sowie die entsprechenden Wasserstoffgehalte aufgelistet. Für die unbeladenen Zugproben erfolgte ebenfalls eine Messung der Wasserstoffkonzentration, um den Grundgehalt des aus der Herstellung stammenden Wasserstoffs zu bestimmen. In *Abbildung 4.48* sind die ermittelten Fließkurven der Proben dargestellt.

Zu sehen ist, dass der Wasserstoff die mechanischen Eigenschaften mehr in der Dehnung als in der Spannung herabsetzt, da die Duktilität des Werkstoffes stark reduziert wird. Unter Einfluss von Wasserstoff wird nur noch eine Zugfestigkeit von  $R_m \sim 700$  MPa bei einer Gleichmaßdehnung von  $A_{gt} \sim 4,3$  % erreicht. Das heißt, dass die Festigkeit um circa 5 %, hingegen die Dehnung um circa 78 % reduziert wurde. Jedoch ist ersichtlich, dass die Fließkurven der wasserstoffbeladenen Zugproben dennoch eine sehr hohe Bruchdehnung aufweisen. Bereits während der Zugprüfung waren etwa bei einer globalen Dehnung zwi-

schen 10 % und 12 % auf der Oberfläche der Zugprobe mehrere Anrisse zu erkennen, *Abbildung 4.49*. Auch andere Autoren können in Zugversuchen unter Einfluss von Wasserstoff Risse an der Oberfläche der Zugproben feststellen [186, 193, 194].

Tabelle 4.1: Ermittelte mechanische Kennwerte und Wasserstoffkonzentrationen der beladenen und unbeladenen Zugproben

	BAM 3	BAM 4	BAM 1	BAM 2	BAM 5	BAM 6
$R_{p0,2}$ in MPa	576	565	582	579	579	556
$R_m$ in MPa	746	740	698	700	700	690
$A_{gt}$ in %	19,6	19,9	4,6	4,7	3,8	4,3
$A$ in % ( $l_e = 35$ mm)	36,5	35,5	33,5	27,5	26	38,5
$j_{HD}$ in mA/cm <sup>2</sup>	0	0	7,4	7,4	15	15
$t_{HD}$ in h	0	0	96	96	96	96
HD in Nml/100 g	~1	~1	163	159	149	163

Nach Betrachtung der Bruchfläche zeigte sich am oberflächennahen Rand der Zugprobe eine makroskopisch spröde Bruchtopographie, *Abbildung 4.50b*. Im Kern der Zugprobe war eine überwiegend duktile Bruchtopographie mit vereinzelt spröden Bruchflächen bzw. Flächen ohne erkennbare Verformung auszumachen, *Abbildung 4.50c* und *Abbildung 4.50d*. Diese Bruchtopographie zeigt, dass große Mengen Wasserstoff im randnahen Bereich gewirkt haben und geringere Wasserstoffkonzentrationen im Kern der Zugprobe vorhanden waren. Deshalb ergeben sich Spannungs-Dehnungs-Kurven, die Anzeichen einer Duktilitätsabnahme als auch duktilen Versagens des Restquerschnittes zeigen.

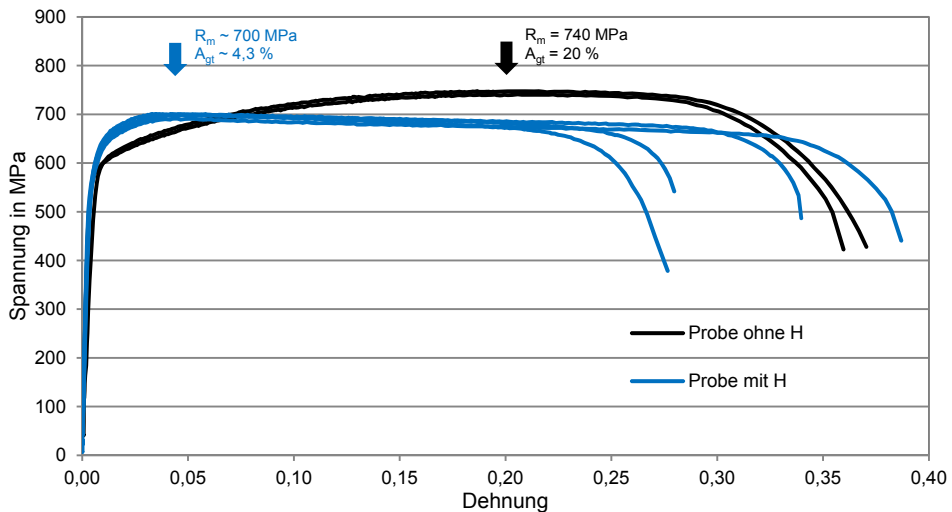


Abbildung 4.48: Technische Spannungs-Dehnungs-Kurven beladener und wasserstofffreier Zugproben



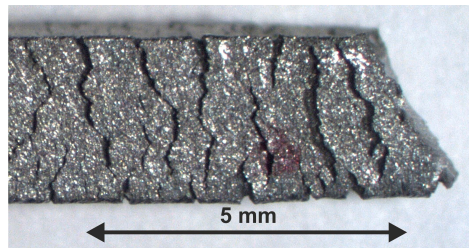
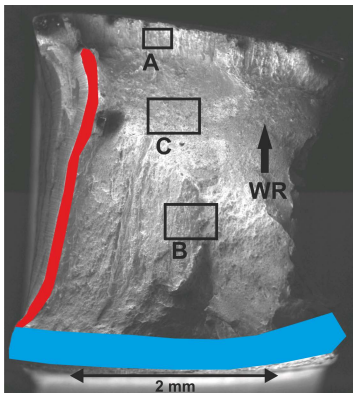


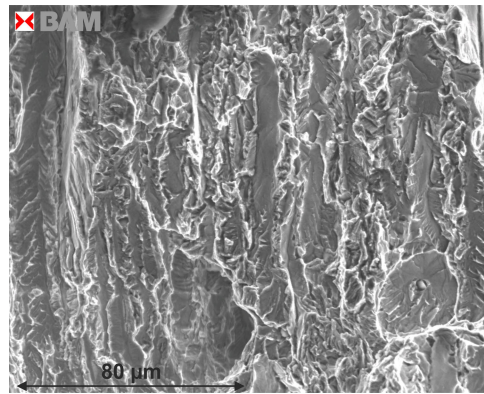
Abbildung 4.49: Makroskopische Rissbildung an der Oberfläche der wasserstoffbeladenen Zugprobe

Zunächst versagte der äußere spröde Randbereich der Zugprobe, was die deutliche Abnahme der Gleichmaßdehnung zeigt. Unter Zunahme der äußeren Last versagte die Zugprobe im Kern duktil unter hoher Kerbwirkung durch die bereits vorhandenen spröden Risse an der Probenoberfläche und minimaler Einschnürung. Der nahezu lineare Abfall der Spannungs-Dehnungs-Kurven der wasserstoffbeladenen Proben kann durch ein Fortschreiten der oberflächennahen Risse und somit eine zunehmende Verkleinerung des Restquerschnittes begründet sein. Für die Umrechnung des Kraft-Weg-Verlaufes in die Spannungs-Dehnungs-Kurve wurde aber nur der Ausgangsquerschnitt der Probe im unverformten Zustand berücksichtigt. Zudem besteht die Möglichkeit, dass der spröde Rand eine Stützwirkung hat und die Verformung des Zugprobenkerns behindert. Je nach Lage der spröden Anrisse zueinander ergibt sich auch ein anderer Restquerschnitt, der noch einschnüren kann, und somit auch eine andere Bruchdehnung. Bei vollständiger Durchsättigung des Gefüges mit Wasserstoff hätte die Zugprobe wohlmöglich restlos spröde ohne weitere Verformung nach Erreichen der Zugfestigkeit bzw. 0,2 % Dehngrenze versagt. Einem Nachweis mit durchgesättigten Zugproben muss in dieser Arbeit jedoch schuldig geblieben werden. Dennoch zeigt die Literatur (*Kapitel 2.3.3*), dass mit zunehmenden Wasserstoffkonzentrationen die Duktilität der Duplexwerkstoffe deutlich reduziert wird und sich die Zugfestigkeit der 0,2 % Dehngrenze annähert.

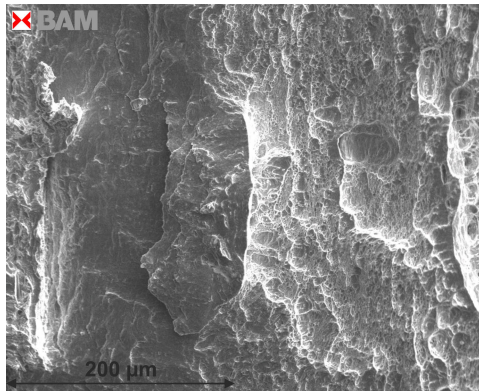
In *Abbildung 4.50a* ist zu sehen, dass der spröde Randbereich in Walzrichtung (blaue Fläche) mit circa 300  $\mu\text{m}$  Breite größer ist als parallel zur Walzrichtung (rote Fläche, 90  $\mu\text{m}$ ). Die unterschiedliche Größe der spröden Flächen im Randbereich ergibt sich aus dem besseren Transport von Wasserstoff in Walzrichtung (längs der Gefügeorientierung). Da der Wasserstoff aufgrund der Orientierung des Gefüges in Walzrichtung besser diffundiert, ist in dieser Richtung auch eine höhere Menge an Wasserstoff von der Oberfläche in die Tiefe des Werkstoffes transportiert worden. Somit ist auch ein größerer Bereich durch hohe Wasserstoffkonzentrationen beeinflusst, der dann spröde versagt. Die makroskopische Versprödung des Randbereiches in wasserstoffbeladenen Zugproben haben auch andere Autoren in ihren Arbeiten feststellen können [185, 186, 193]. Im Bereich des makroskopisch spröden Randes der Probe sind Spaltbruchflächen als auch Flächen duktilen Gewaltbruchs (linker Bildrand, *Abbildung 4.50b*) zu finden. Die duktil verformten Areale deuten auf austenitische Bereiche im Gefüge hin. In der Literatur lassen sich ähnliche Bruchtopographien für die austenitische Phase von Duplexstählen unter Einfluss von Wasserstoff feststellen (*Kapitel 2.3.3*) und werden als „ductile tearing“ deklariert [15, 54, 75]. Das bedeutet, dass trotz der hohen Wasserstoffkonzentrationen, welche in größeren Anteilen nahe der Oberfläche situiert waren, die austenitische Phase noch ein hohes Maß an Duktilität besaß.



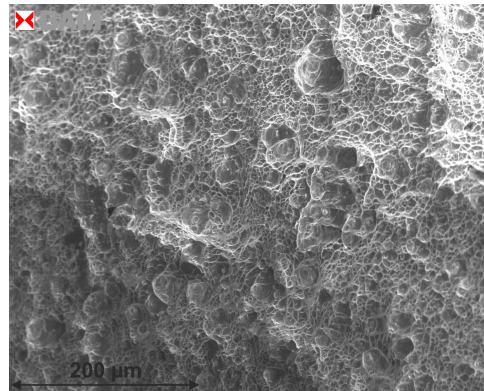
a) Übersicht der Bruchfläche mit spröden Randbereichen (blaue und rote Fläche) sowie Walzrichtung und Ort der Detailaufnahmen



b) Bruchtopographie Detail A



c) Bruchtopographie Detail B



d) Bruchtopographie Detail C

Abbildung 4.50: REM-Aufnahmen der Bruchfläche einer wasserstoffbeladener Zugprobe

Aber auch im Kern der Zugprobe sind zum einen größere Bereiche ohne erkennbare Verformung (Abbildung 4.50c) als auch viele kleine spröde Flächen innerhalb der duktilen Bruchtopographie zu finden, (Abbildung 4.50d). Auch hier muss Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften gewirkt haben, jedoch war die Wasserstoffkonzentration in diesen Bereichen weitaus geringer. Denkbar ist, dass der Wasserstoff innerhalb der ferritischen Phase des Werkstoffes auch in tiefere Bereiche der Zugprobe transportiert wurde und so die mechanischen Eigenschaften, vornehmlich die des  $\delta$ -Ferrits, herabgesetzt hat. Dadurch wäre die spröde Bruchtopographie in duktiler Umgebung erklärbar. Solch fraktographische Erscheinungen wie in (Abbildung 4.50d) gezeigt, werden auch in der Literatur mehrfach für Duplexstähle beschrieben [75, 185, 188, 191] und zumeist mit geringen, im Gefüge wirkenden Wasserstoffkonzentrationen in Verbindung gebracht. So berichten zum Beispiel Altstetter und Koautoren [75, 191] von diesen flachen Flächen in duktiler Bruchtopographie bei Wasserstoffkonzentrationen von 4 wt.-ppm ( $\sim 4,5 \text{ Nm}l/100 \text{ g Fe}$ ).

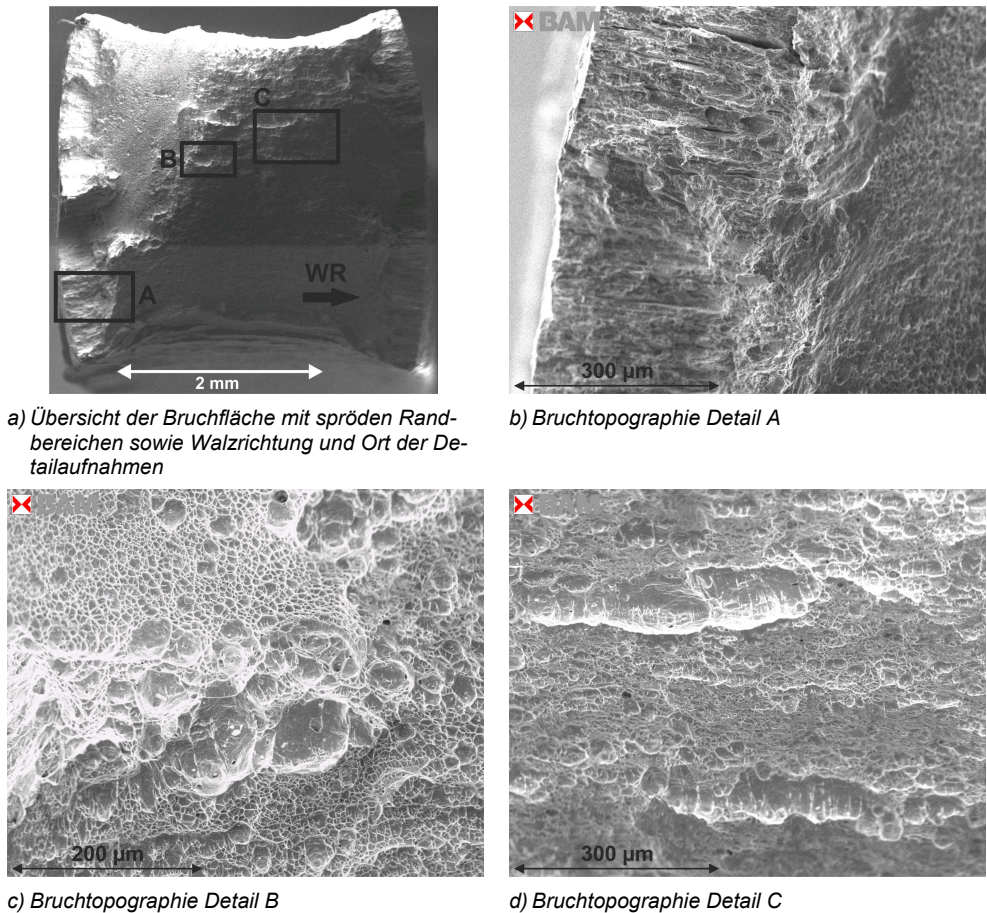
Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass der Einfluss von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls makroskopisch in einer Herabsetzung des Dehnungsvermögens sichtbar wird. Die kurzen Beladungszeiten reichen nicht aus, um den Wasserstoff homogen in der Zugprobe zu verteilen. Oberflächennah führen hohe Wasserstoffkonzentrationen zum makroskopisch spröden Versagen im Randbereich, wobei eine detailliertere Betrachtung des spröden Randbereichs neben Spaltbruchflächen auch duktile Bruchtopographien zeigte. Hingegen liegen im Kern der Zugprobe geringere Wasserstoffkonzentrationen vor und der Werkstoff versagt hier überwiegend duktil. Dennoch sind auch im Kern Bruchflächen ohne plastische Verformung auszumachen. Die unterschiedliche Breite des makroskopisch spröden Randbereiches quer und parallel zur Walzrichtung lässt sich über das Wasserstofftransportverhalten erklären und korreliert mit der zügigen Diffusion in Längsrichtung der Gefügeorientierung.

#### 4.4.3 Ergebnisse der in-situ Beugungsexperimente im Zugversuch

Vor Durchführung der in-situ Beugungsexperimente wurde zunächst am Versuchsstand der Beamline EDDI am HZB Berlin mit der dort zur Verfügung stehenden Zugprüfmaschine ein Zugversuch ohne Messung der Phasenspannungen durchgeführt. Dieser diente der Aufnahme der Spannungs-Dehnungs-Kurve unter Berücksichtigung der Maschinensteifigkeit zur Festlegung der Haltepunkte für die Beugungsmessung an der belasteten Probe. An den jeweiligen Haltepunkten wurde eine Messung der phasenspezifischen Spannungen durchgeführt. Dazu wurde die Probe in 11 äquidistanten Winkeln bis auf  $90^\circ$  unter gleichbleibender Last durchgekippt. Für alle Winkel zwischen  $0^\circ$  und  $90^\circ$  wurde jeweils für 60 Sekunden ein Beugungsspektrum aufgenommen, um die Reaktionsspannungen in den beiden Phasen berechnen zu können. Im plastischen Bereich der Kurve wurde vor Durchführung der Messung gewartet, bis die Probe relaxiert war. Bedingt durch den Verlauf der Spannungs-Dehnungs-Kurve ist der in-situ Zugversuch bis 6 kN kraftgeregelt und danach bis zum Versagen weggeregelt erfolgt, wobei für die Wegregelung ein relativer Verfahrensweg genutzt wurde. Für die wasserstoffbeladene Zugprobe ist dabei im plastischen Bereich eine feinere Auflösung mit zwei weiteren Haltepunkten gewählt worden als für die wasserstofffreie Zugprobe, um das phasenspezifische mechanische Verhalten in diesem Bereich besser zu erfassen. Im Vorversuch zeigten sich im Bereich der zusätzlich eingefügten Haltepunkte bereits die Risse an der Zugprobenoberfläche. Aufgrund des begrenzten Kolbenweges der Zugprüfmaschine und der gewählten Probengeometrie war ein Zugversuch bis zum duktilen Versagen der Zugprobe nicht möglich. Jedoch wurde in allen Fällen die Zugfestigkeit des Werkstoffes erreicht. Da diese Versuche zeitlich vor den ex-situ Zugversuchen stattfanden, war die unvollständige Sättigung der Zugprobe und der damit verbundene spröde Randbereich noch nicht bekannt.

Nach Beendigung der in-situ Beugungsexperimente wurden analog zu den ex-situ Zugversuchen die Wasserstoffkonzentrationen als auch die Bruchtopographien ermittelt. Die Wasserstoffkonzentration in den Zugproben betrug 84 Nml/100 g Fe. Zum Vergleich wurde auch der Wasserstoffgehalt der Referenzprobe bestimmt, welche unter den gleichen Bedingungen mit Wasserstoff beladen und während der gesamten Versuchszeit in flüssigem Stickstoff gelagert wurde. Die Wasserstoffkonzentration der Referenzprobe betrug 87,5 Nml/100 g Fe. Das bedeutet, dass während der knapp fünfstündigen Versuchsdurchführung ein Wasserstoffverlust von unter fünf Prozent auftrat. Für die in-situ Beugungsexpe-

imente ergab sich trotz der geringeren Wasserstoffkonzentration die gleiche Bruchtopographie wie in den ex-situ Versuchen, *Abbildung 4.51*.

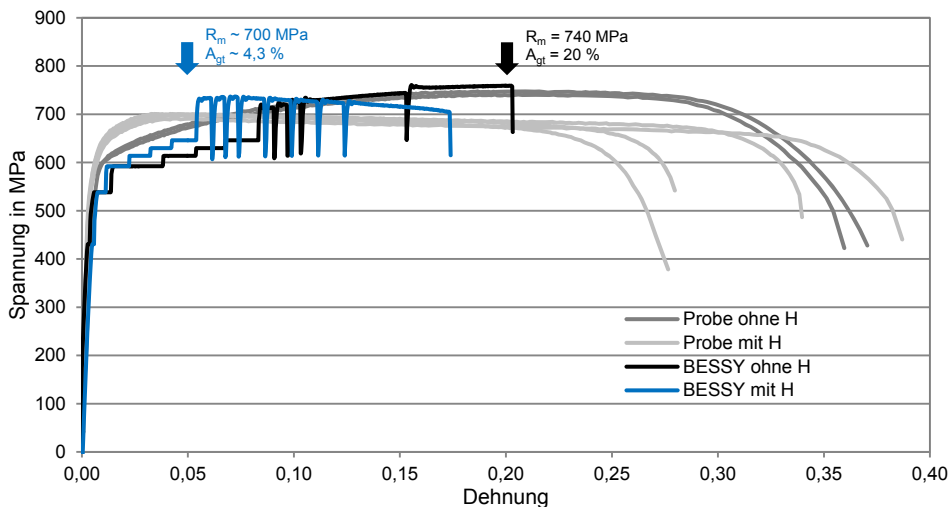


*Abbildung 4.51: REM-Aufnahmen der Bruchfläche einer wasserstoffbeladener Zugprobe aus den in-situ Beugungsexperiment im Zugversuch*

Nachfolgend werden zunächst die globalen Spannungs-Dehnungs-Kurven der wasserstofffreien und -beladenen Zugproben des in-situ Beugungsexperimentes vergleichend zu den Kurven der ex-situ Zugversuche dargestellt. Anschließend wird auf die phasenspezifischen Spannungs-Dehnungs-Kurven der in-situ Zugversuche eingegangen.

#### 4.4.3.1 Vergleich der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven der ex-situ Zugversuche und der in-situ Beugungsexperimente

In *Abbildung 4.52* sind die makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven aus den in-situ Beugungsexperimenten den Kurven der ex-situ Zugversuche gegenübergestellt. Zudem sind im Diagramm die Zugfestigkeiten und die zugehörigen Gleichmaßdehnungen der ex-situ Zugversuche gezeigt. Im Vergleich der Kurven ist zu sehen, dass die jeweiligen Kurven mit und ohne den Einfluss von Wasserstoff qualitativ die gleichen Verläufe aufweisen. Bedingt durch die Unterbrechung des Zugversuches an den Haltepunkten findet im plastischen Bereich des Werkstoffes eine Relaxation statt und die Spannungen bauen sich durch plastische Verformung im Material ab. Die wasserstofffreie Zugprobe (schwarze Kurve) erreicht im weggesteuerten Bereich die gleiche Spannung wie im ex-situ Versuch. Ein leichter Anstieg der Spannung ist zu verzeichnen, da die Probe durch die Relaxation etwas stärker verfestigt. Im Vergleich dazu ist für die wasserstoffbeladene Zugprobe (blaue Kurve) festzustellen, dass die Relaxation zu Beginn im Bereich der Kraftregelung weniger stark ausfällt. Der zurückgelegte Weg (Dehnung) am letzten Haltepunkt der Kraftregelung ist im Vergleich zur unbeladenen Zugprobe geringer. Hier wird während der Relaxation ein circa 40 % geringerer Weg aufgezeichnet, was einer weniger starken makroskopischen Dehnung entspricht. Im Bereich der Wegregelung ist ein etwas größerer Abfall der Spannung am Haltepunkt, von 100 MPa im unbeladenen Zustand und 120 MPa im beladenen Zustand, zu verzeichnen.



*Abbildung 4.52: Vergleich der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven aus den in-situ Beugungsexperimenten mit den Kurven der ex-situ Zugversuche*

Der Einfluss von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls ist bei Betrachtung der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven offensichtlich. Die geringere Relaxation der wasserstoffbeladenen Zugproben lässt sich mit Hilfe der Plastizitätstheorie (*Kapitel 2.3.2*) erklären. Jedoch lässt sich nicht festlegen ob primär ein „softening“ oder ein „hardening“ stattgefunden hat, da in diesem Fall mehrere Faktoren Einfluss ausüben. Zum einen ist die Wasserstoffkonzentration innerhalb der Zugprobe sehr inhomogen

verteilt, was auch zur makroskopisch spröden Rissbildung in den Randbereichen führt. Zum anderen kann die Rissbildung in den Phasen des Duplexstahls unterschiedlichen Mechanismen unterliegen. Zumal in den Phasen selbst auch eine unterschiedliche Wasserstoffkonzentration vorliegt und die Phasen unterschiedlich auf Wasserstoff reagieren. So können zum Beispiel Abraham und Altstetter [183] für einen austenitischen Stahl zunächst ein „hardening“ Effekt feststellen. Mit Zunahme der Wasserstoffkonzentration nimmt die Verfestigung jedoch wieder ab und es stellt sich eine Diskontinuität der Fließgrenze ein, berichten die Autoren. Zudem kann die Spannungs-Dehnungs-Verteilung in den Phasen sehr unterschiedlich sein, wie in *Kapitel 4.2* bereits gezeigt wurde. All diese Effekte wirken auf die Rissinitiierung und den Rissfortschritt.

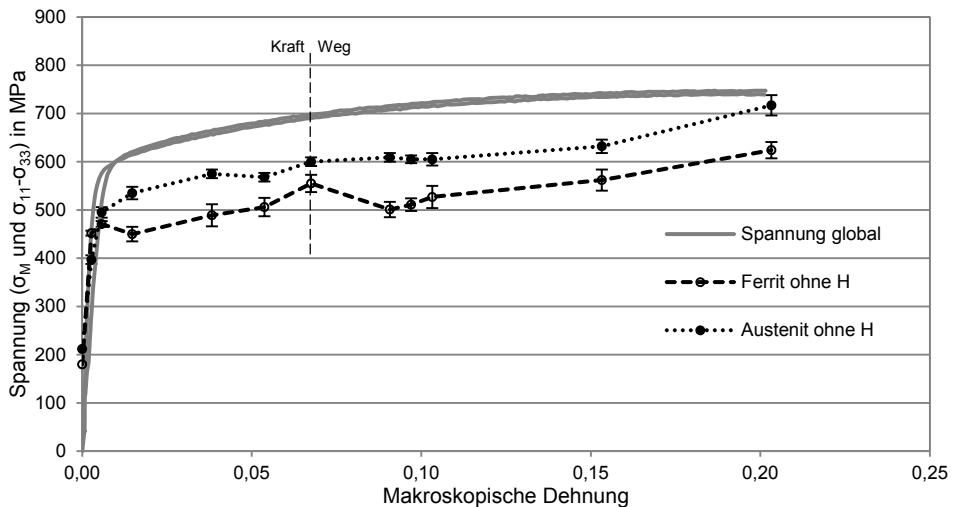
Für eine Verfestigung, das heißt, eine erschwerte Versetzungsbewegung (*Kapitel 2.3.2*), würde sprechen, dass der Werkstoff unter Einfluss von Wasserstoff weniger stark relaxiert und höhere Spannungen erreicht werden. In Verbindung mit einer Verfestigung wird zumeist eine spröde Bruchfläche assoziiert wie sie am Rand und vereinzelt im Kern der Zugprobe zu finden ist. Im Fall des „softening“ bzw. einer Entfestigung wird von einer sehr lokalen Herabsetzung der Fließgrenze ausgegangen, was dem HELP-Mechanismus [148] entspricht, wodurch die Versetzungsbewegung erleichtert wird. In Verbindung mit dem HELP-Mechanismus wird häufig eine duktile Bruchtopographie beschrieben, wobei durch das sehr lokale Fließen auch kleinere Grübchen (engl.: dimples) entstehen [79]. Zumeist wird ein „softening“ bei geringen Dehnraten und häufig nur in reinen Metallen beobachtet [79]. Lynch [79] beschreibt zudem, dass ein eventuelles „softening“ durch die Effekte des „hardening“ verdeckt werden kann.

Unter Berücksichtigung dieser Aussagen kommt das beobachtete Verhalten eher einer Verfestigung näher. Da aber auch ein hoher Anteil duktiler Bruchtopographie vorliegt, ist ein „softening“ nicht auszuschließen.

### 4.4.3.2 Phasenspezifische Auswertung der in-situ Beugungsexperimente

Im Folgenden sollen die unter Last ermittelten Spannungen in der austenitischen und ferritischen Phase des Duplexstahls beschrieben werden. Die Phasenspannungen werden dabei über die Grundgleichung der röntgenographischen Spannungsanalyse aus den gemessenen Gitterabständen berechnet, *Kapitel 3.3* ([230]). Da die Messung im Modus Transmission durchgeführt wurde, lässt sich über das verwendete  $\sin^2\psi$  Verfahren zur Auswertung nur die Differenzspannung aus der Spannung in Zugrichtung ( $\sigma_{11}$ ) und der Spannung quer zur Zugrichtung ( $\sigma_{33}$ ) ermitteln. Das heißt, dass die ermittelten Phasenspannungen quasi nur den deviatorischen Anteil der Spannungen wiedergeben. So kann sich eine gemessene Spannung von  $(\sigma_{11}-\sigma_{33}) = 0$  aus einer positiven Spannung von 100 MPa in  $\sigma_{11}$ -Richtung und einer positiven Spannung von 100 MPa in  $\sigma_{33}$ -Richtung ergeben. Die Höhe der Spannung  $\sigma_{33}$  ist jedoch nicht bekannt. Zudem beeinflussen auch „load sharing“ Effekte die ermittelten Phasenspannungen [60, 63]. Dennoch lassen sich so Aussagen zur phasenspezifischen mechanischen Reaktion auf eine äußere makroskopische Last treffen. Die so ermittelten Phasenspannungen sind Spannungsmittelwerte der in den Phasen inhomogen verteilten Spannungen.

In *Abbildung 4.53* sind die Phasenspannungen der wasserstofffreien Zugprobe vergleichend zum makroskopischen Verhalten des Duplexstahls (ex-situ Zugversuche) dargestellt. Die Spannungen sind über die jeweils makroskopisch aufgenommenen Dehnungen abgetragen. Zu sehen ist, dass die phasenspezifischen Spannungen der austenitischen Phase höher sind als die Spannungen der ferritischen Phase. Scheinbar trägt die austenitische Phase in diesem Fall die größere Last bzw. sind die Reaktionsspannungen in dieser Phase höher. Jedoch besteht hier keine Kenntnis über die vorliegenden thermisch bedingten Eigenspannungen bzw. die thermisch bedingten Dehnungen. Aus der in *Kapitel 2.2* diskutierten Literatur geht hervor, dass in der austenitischen Phase zumeist thermisch bedingte Zugeigenspannungen und in der ferritischen Phase Druckeigenspannungen vorliegen. In der Arbeit von Harjo et al. [57] werden die thermisch bedingten Dehnungen für die Bestimmung der Gitterdehnung, hervorgerufen durch eine äußere Last, von den gemessenen Gesamtdehnungen abgezogen. Aufgrund der Vorzeichen der thermisch bedingten Dehnungen ergibt sich dann für die ferritische Phase eine höhere Beanspruchung.

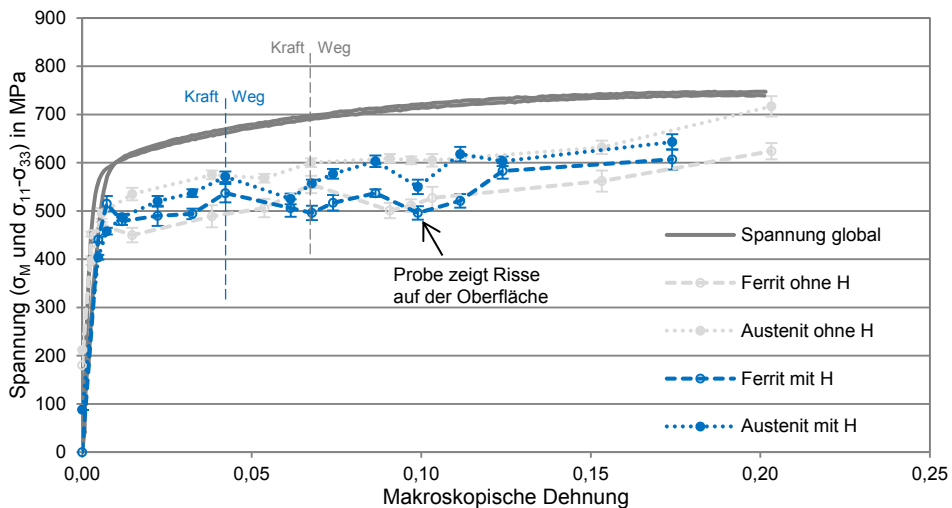


*Abbildung 4.53: Phasenspannungen ( $\sigma_{11}-\sigma_{33}$ ) der wasserstofffreien Zugprobe im Vergleich zu den globalen Makrospannungen ( $\sigma_M$ ) aus den ex-situ Zugversuchen*

Zu sehen ist auch, dass die Phasenspannungen in beiden Phasen niedriger sind als die makroskopische Spannung. Hier bleibt aber noch einmal festzuhalten, dass die berechneten Dehnungen nur eine Spannungsdifferenz wiedergeben und die Höhe der Spannungen quer zur Zugrichtung nicht bekannt sind. Daher ist hier keine direkte Aussage zur Phasenspannung in Zugrichtung möglich. Dennoch ist der qualitative Verlauf der Kurven ähnlich dem makroskopischen Verhalten. Bedingt durch die Umstellung von Kraft- auf Wegregelung ist kurzzeitig ein leichter Abfall in den Phasenspannungen der ferritischen Phase zu erkennen, während die der austenitischen Phase nahezu konstant bleiben. Dieser Abbau der Spannungen kann durch eine Entlastung im Gefüge entstehen. Da dieser Abfall nur in der ferritischen Phase auftritt, könnte vermutet werden, dass die ferritische Phase stärker belastet war. Jedoch ist ein Nachweis für die höhere Beanspruchung der ferritischen Phase in dieser Messung nicht zugänglich.

In *Abbildung 4.54* sind die entsprechenden Phasenspannungen der wasserstoffbeladenen Zugprobe vergleichend den Phasenspannungen der wasserstofffreien Zugprobe sowie den Makrospannungen aus den ex-situ Zugversuchen mit den wasserstofffreien Zugproben gegenübergestellt. Zu sehen ist, dass auch hier die Spannung in der austenitischen Phase höher ist als in der ferritischen Phase und beide Kurven unterhalb der makroskopischen Spannung verlaufen. Zudem ist zu erkennen, dass hier eine deutlich geringere Dehnung erreicht wird, daher ist der Punkt der Umstellung von Kraft- auf Wegregelung auch zu einer geringeren makroskopischen Dehnung verschoben. Im Vergleich mit der wasserstofffreien Probe werden hier etwa die gleichen Spannungen in den Phasen erreicht.

Bei Betrachtung der Kurven fällt auf, dass die Phasenspannungen der ferritischen Phase zu Beginn der plastischen Verformung (Dehngrenze) etwas höher ausfallen als für die wasserstofffreie Zugprobe. Dies könnte ein Hinweis auf eine Verfestigung in der ferritischen Phase, hervorgerufen durch Wasserstoff, sein. Auch ist auffällig, dass die Phasenspannungen nach der Umstellung der Regelung von Kraft auf Weg noch ein zweites Mal abfallen. An diesem Messpunkt waren auch äußerlich auf der Zugprobenoberfläche bereits die ersten Risse erkennbar. Daher könnte dieser zweite Abfall in den Phasenspannungen mit einer Entlastung des Gefüges durch eine Rissbildung im Zusammenhang stehen. Ein ähnliches Verhalten wurde auch in in-situ Experimenten an einer Duplex-Guss Legierung festgestellt und mit einer Rissbildung in der ferritischen Phase begründet [239]. Durch das Versagen des spröden Randbereichs bei geringen Dehnungen kommt es zur Entlastung in der Zugprobe. Mit Zunahme der äußeren Last steigen die Phasenspannungen wieder an, da der duktilere Kern jetzt die Last trägt. Ein eindeutiger Nachweis für den Einfluss von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften der Phasen lässt sich aus diesen Kurven jedoch nicht ableiten. Dennoch sind Merkmale einer Degradation durch Wasserstoff bzw. einer Werkstoffschädigung vorhanden.



*Abbildung 4.54: Phasenspannungen ( $\sigma_{11}-\sigma_{33}$ ) der beladenen Zugprobe im Vergleich zu dem Phasenspannungen der wasserstofffreien Zugprobe und zu den globalen Makrospannungen ( $\sigma_M$ ) aus den ex-situ Zugversuchen*



Zusammenfassend bleibt für die Versuche festzuhalten, dass die hier durchgeführten Beugungsexperimente prinzipiell geeignet sind, um den Einfluss von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften der Phasen des Duplexstahls in-situ zu ermitteln. Bedingt durch die inhomogene Wasserstoffverteilung in der Zugprobe kommt es jedoch zur Überlagerung verschiedener Effekte, die eine eindeutige Aussage für diese Experimente nicht zulassen. Makroskopisch war eine Verfestigung durch Wasserstoff feststellbar, die sich in einer geringeren Relaxation an den Haltepunkten äußerte. Für die Phasenspannungen war ein leichter Anstieg der Dehngrenze in der ferritischen Phase zu sehen. Die makroskopische Rissbildung auf der Oberfläche der Zugprobe führte zu einem Abfall der Spannungen in beiden Phasen. Auch andere Autoren haben solch einen Abfall der Phasenspannungen beobachtet und mit einer Rissbildung assoziiert. Um hier jedoch präzisere Aussagen zum phasenspezifischen mechanischen Verhalten unter Wasserstoff treffen zu können, sollten optimalere Randbedingungen für die Experimente gewählt werden, damit sich die Effekte des Wasserstoffs deutlicher abzeichnen.



## 5 Schlussfolgerungen

Die Arbeit befasste sich mit der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in austenitisch-ferritischen Duplexstählen, besonders im Duplexwerkstoff X2CrNiMoN 22-5-3 (Wst.-Nr.: 1.4462). Aus der Literatur geht hervor, dass Duplexwerkstoffe eine verbesserte Resistenz gegenüber einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung aufweisen als ferritische korrosionsbeständige Stähle. Dennoch traten bei der Verwendung von Duplexwerkstoffen immer wieder Schadensfälle auf, deren Ursache auf die Wirkung von Wasserstoff zurückzuführen war. Zumeist führt neben hohen lokalen Wasserstoffkonzentrationen auch eine hohe lokale Beanspruchung, z.B. aus der Fertigung resultierend, im gegenseitigen Zusammenspiel zur Werkstoffschädigung. Die Klärung der Schadensursache an den versagten Bauteilen erfolgt zumeist über Basisversuche und selten mit Hilfe von Prüfketten, bei denen die numerische Simulation eine wesentliche Rolle spielt. Durch die begleitenden numerischen Analysen lassen sich die Ergebnisse von standardisierten Labortests bis hin zu „full scale“ Tests (Bauteilversuche) übertragen.

Die Duplexwerkstoffe bieten hier jedoch eine Besonderheit, bedingt durch ihr austenitisch-ferritisches Gefüge. Die austenitische und ferritische Phase unterscheiden sich nicht nur im mechanischen Verhalten voneinander sondern auch im Wasserstofftransportverhalten. Daraus ergibt sich auch eine unterschiedliche Empfindlichkeit der Phasen gegenüber einer Degradation ihrer mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff und somit auch eine differente Werkstoffschädigung in den Phasen. Die bisherigen numerischen Arbeiten zur wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung beschränkten sich jedoch auf das makroskopische Verhalten. Auch auf der Mesoebene wurde das mechanische Verhalten der Duplexstähle bereits numerisch analysiert. Jedoch existiert bisher kein numerisches Modell zur Abbildung einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung im Duplexstahl auf der Mesoebene unter Berücksichtigung lokaler Spannungen und Dehnungen sowie lokaler Wasserstoffkonzentrationen in den Phasen der Duplexwerkstoffe.

Aus diesem Zusammenhang heraus bestand die Aufgabe darin, ein einfaches numerisches Modell zu erstellen, welches unter Berücksichtigung der Wasserstoffverteilung und der lokalen Beanspruchung die Darstellung der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in den Phasen des Duplexstahls erlaubt. Mit solchen Modellen realer Gefüge lässt sich ein wertvoller Beitrag zur Klärung von Schädigungsmechanismen leisten, um das Verständnis für die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung in Duplexwerkstoffen zu verbessern. Zudem lassen sich mit Hilfe dieser numerischen Herangehensweisen Ergebnisse besser deuten und zwischen Laborexperiment und realem Bauteil übertragen.

Erstmals wurden das Wasserstofftransportverhalten und die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung auf der Mesoebene in den Phasen des Duplexwerkstoffes numerisch abgebildet. Aus den numerischen Analysen lassen sich risskritische Bereiche im Gefüge in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration und dem phasenspezifischen mechanischen Verhalten ermitteln.

Neben der numerischen Herangehensweise wurde erstmalig versucht, in in-situ Beugungsexperimenten das phasenspezifische Verhalten der austenitisch-ferritischen Duplexstähle unter Einfluss von Wasserstoff zu ermitteln.

Aus den Ergebnissen der numerischen Analyse und den Experimenten lassen sich folgende Schlussfolgerungen ableiten:

1. Der Wasserstofftransport erfolgt im Duplexgefüge bei Raumtemperatur primär über die ferritische Phase, da der Diffusionskoeffizient um bis zu fünf Dekaden höher ist. Innerhalb kürzester Zeit werden Wasserstoffkonzentrationen in Höhe der Sättigungskonzentration des  $\delta$ -Ferrits erreicht. Die Diffusion des Wasserstoffs in die austenitische Phase benötigt weitaus mehr Zeit, weshalb die Wasserstoffkonzentration im Austenit nur allmählich zunimmt. Im Zusammenhang mit dem geringeren Verformungsvermögen der ferritischen Phase ergibt sich daraus im ersten Ansatz ein erhöhtes Risiko einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung in der ferritischen Phase des Duplexstahls. Makroskopisch resultiert aus dem unterschiedlichen Transportverhalten der Phasen eine Abhängigkeit der Wasserstoffdiffusion von der Orientierung der austenitischen und ferritischen Phase im Duplexgefüge. Die Diffusion längs der Gefügeorientierung bzw. der Orientierung der ferritischen Phase verläuft schneller. Quer zur Gefügeorientierung ergeben sich verwundene Diffusionspfade in der ferritischen Phase, was längere Diffusionszeiten bedingt. Die Ergebnisse des numerisch simulierten Wasserstofftransports im Duplexstahl stehen in guter Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen aus der Literatur.
2. Eine beschleunigte Diffusion an der Phasengrenze bewirkt zu Beginn der Wasserstoffeinbringung eine etwas schnellere Sättigung der ferritischen Phase. Ist im  $\delta$ -Ferrit des Duplexstahls erst eine homogene Wasserstoffverteilung erreicht, geht der Effekt der beschleunigten Diffusion verloren und die Diffusion des Wasserstoffs in der austenitischen Phase wird der geschwindigkeitsbestimmende Faktor des Wasserstofftransports. Jedoch kann die schnellere Sättigung des  $\delta$ -Ferrits zu einer früheren Rissbildung führen, da die Rissinitiierung in Duplexstählen zumeist an der Phasengrenze im  $\delta$ -Ferrit einsetzt und entsprechend hohe Wasserstoffkonzentrationen dies begünstigen. Eine verzögerte Diffusion an der Phasengrenze (Trapping) wirkt als zusätzliche Barriere für den Wasserstofftransport in den Austenit, sodass für die Sättigung der austenitischen Phase weitaus mehr Zeit benötigt wird im Vergleich zum ungehinderten Wasserstoffeintritt in diese Phase. Aus der Literatur geht hervor, dass sich beide Phänomene nicht gegenseitig ausschließen müssen. Eine Phasengrenze dient also als Pfad erhöhter Diffusion und gleichzeitig wird die Diffusion des Wasserstoffs von der Phasengrenze („lockerer“ Atomverbund) in das jeweilige Kristallgitter erschwert. Für Experimente zur Wasserstoffbeladung von Duplexstählen sollten daher längere Beladungszeiten genutzt werden, um die vollständige und homogene Sättigung des Duplexgefüges zu gewährleisten.
3. Ausgehend von einer homogen verteilten Wasserstoffkonzentration verbleiben bei der Effusion höhere Mengen an Wasserstoff, auch nach längeren Effusionszeiten in der austenitischen Phase des Duplexstahls. In der ferritischen Phase hingegen wird die Wasserstoffkonzentration, bedingt durch den höheren Diffusionskoeffizienten, schneller abgebaut. Dieses Verhalten korreliert sehr gut mit experimentellen Ergebnissen von ToF-SIMS Untersuchungen an deuteriumbeladenen Proben aus Duplexstahl. Für den Fall des Trapping an der Phasengrenze wird eine Reduktion der Wasserstoffkonzentration in der austenitischen Phase zusätzlich erschwert. Dennoch kann durch mechanische oder thermische Beanspruchung des Gefüges eine Freisetzung des Wasserstoffs

in die ferritische Phase erfolgen und somit zur Rissbildung führen. Im Austenit selbst können hohe Wasserstoffkonzentrationen zu einem veränderten Verformungsverhalten führen und einen schnelleren Rissfortschritt begünstigen. Die Literatur zeigt, dass Wasserstoff ein martensitisches Umklappen des Austenits begünstigen kann. Auch haben ToF-SIMS Experimente gezeigt, dass es im Austenit durch die Wirkung von Wasserstoff zu einer Zwillingbildung und entlang der Zwillinge zu einer parallelen Rissbildung kommen kann. Dabei kann die Rissbildung auch ohne eine zusätzliche äußere mechanische Beanspruchung erfolgen. Zudem beeinflussen hohe Wasserstoffkonzentrationen die Versetzungsbewegung in der austenitischen Phase und können somit eine Rissbildung im Austenit begünstigen.

4. Aus der resultierenden Erstarrungsmorphologie der Schweißnahtgefüge von Duplexstählen ergibt sich im Vergleich zum Grundwerkstoff ein stark verzögerter Wasserstofftransport. Die Gefügestruktur (Widmanstätten-Struktur) führt zu stark verwundenen Diffusionspfaden bzw. zu sehr geringen Diffusionsquerschnitten in der ferritischen Phase. Werden große Mengen an Wasserstoff z.B. über den Schweißprozess in den Werkstoff eingebracht, so verbleiben auch größere Mengen an Wasserstoff über einen längeren Zeitraum in der ferritischen Phase, da diese teilweise vollständig vom Austenit umschlossen ist. Zusätzlich wird der Wasserstoff an Chromnitriden im  $\delta$ -Ferrit getrappt. Daher bleibt für einen längeren Zeitraum die Gefahr der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung bestehen. Aus diesem Grund ist mit einer erhöhten Gefahr für die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung in den Schweißnahtgefügen des Duplexstahls zu rechnen.
5. Unter der Annahme des ebenen Spannungszustandes ergibt sich für die numerisch ermittelten technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven im zweidimensionalen, im dreidimensionalen Modell und im Modell des Realgefüges eine gute Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Werten. Mit den unterschiedlichen, angenommenen mechanischen Eigenschaften der Phasen lassen sich sehr ähnliche makroskopische Spannungs-Dehnungs-Verläufe erzeugen. Ein Rückschluss vom makroskopischen Verhalten auf die mechanischen Eigenschaften der Phasen ist nicht möglich und es sollte daher im Zusammenhang mit einer wasserstoffunterstützten Rissbildung immer das phasenspezifische Verhalten berücksichtigt werden.
6. Die aus der phasenspezifischen Beanspruchung berechneten makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven des einfachen Modells befinden sich in sehr guter Übereinstimmung mit den theoretischen Annahmen für das mechanische Verhalten von zweiphasigen Gefügen. Die berechneten Spannungs-Dehnungs-Kurven aus dem Modell des Realgefüges zeigen ebenfalls eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. In diesem Zusammenhang kann die Gültigkeit der Mischungsregel nach Tamura et al. [50] zur Berechnung der makroskopischen Spannungen und Dehnungen aus dem phasenspezifischen Spannungs-Dehnungs-Verhalten bestätigt werden.
7. Für beide Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens war ersichtlich, dass die weichere Phase immer bevorzugt gedehnt wird und die festere Phase eine höhere Spannung aufweist. Jedoch resultiert nur für den ersten Fall des phasenspezifischen Verhaltens (keine Überschneidung der Spannungs-Dehnungs-Kurven) eine höhere plastische Verformung der austenitischen Phase, wie es auch für experimentelle Unter-

suchungen beschrieben wird. Zudem hat sich im ersten Fall des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens ein Unterschied der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für die Belastung quer und längs der Gefügeorientierung gezeigt. Dieses Verhalten entspricht der in der Literatur diskutierten Anisotropie der mechanischen Eigenschaften in Anhängigkeit der Walzrichtung, welche neben der Textur der Phasen auch durch die zeitliche Anordnung der austenitischen und ferritischen Phase bedingt wird.

8. Die makroskopische Belastung des Duplexstahls ergibt lokal in den Phasen eine weit- aus höhere Beanspruchung. Bereits im makroskopisch elastischen Bereich treten lokal plastische Verformungen in den Phasen auf und es kann bei ausreichend hohen Wasserstoffkonzentrationen bereits zu einer Schädigung des Gefüges kommen. Die inhomogene Verteilung der Spannungen und Dehnungen in den einzelnen Phasen resultiert aus der Form und Anordnung der Phasen zur Belastungsrichtung. In Abhängigkeit vom mechanischen Verhalten der austenitischen und ferritischen Phase ergibt sich für die festere Phase eine hohe Beanspruchung in taillierten Bereichen, die längs der Belastungsrichtung orientiert sind. In der weicheren Phase sind die höchst beanspruchten Bereiche in schmalen Stegen mit einer Ausrichtung senkrecht zur Belastungsrichtung zu finden und weitaus lokaler im Gefüge verteilt („hot spots“). Die erzielten Ergebnisse befinden sich in sehr guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen numerischer Betrachtungen an vergleichbaren Stählen sowie mit experimentellen Untersuchungen phasenspezifischer Spannungen und Dehnungen.
9. Hinsichtlich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung sind beide Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens als kritisch einzustufen. Jedoch erscheint der erste Fall ( $\delta$ -Ferrit besitzt höhere Festigkeit, keine Überschneidung der Kurven) bei Betrachtung der erzielten Ergebnisse sinnvoller, da sich in diesem Fall mehrere Überschneidungen zum realen mechanischen Verhalten des Duplexstahls X2CrNiMoN 22-5-3 ergeben. Hier konnte im ersten Fall eine Anisotropie der mechanischen Eigenschaften in Abhängigkeit der Gefügeorientierung festgestellt werden und es ergibt sich auch eine höhere plastische Verformung für die austenitische Phase. Zudem lässt sich eine bessere Übereinstimmung zwischen den simulierten und experimentell ermittelten phasenspezifischen Spannungen (Beugungsexperimente) in Abhängigkeit von der makroskopischen Beanspruchung feststellen. Dennoch ist der zweite Fall (Überschneidung der Spannungs-Dehnungs Kurven der Phasen) nicht auszuschließen und hinsichtlich einer wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung als ebenso kritisch einzustufen, da hier bei geringeren makroskopischen Dehnungen (nach Überschneidung der Kurven) höhere plastische Verformungen in der ferritischen Phase zu verzeichnen sind.
10. Das numerische Modell des Realgefüges ist in der Lage das makroskopische Verhalten des Duplexstahls als auch die phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen abzubilden. Dadurch lassen sich mit den Simulationen im Vergleich mit modernen Experimenten (Beugungsmethoden zur Bestimmung phasenspezifischer Spannungen und Dehnungen) wertvolle Hinweise zur Beschreibung der lokalen Verformung des Duplexgefüges und somit zu möglichen risskritischen Bereichen liefern.

11. Die Element-Elimination-Technique (EET) ist eine geeignete Methode, um risskritische Bereiche im Duplexgefüge in Abhängigkeit des mechanischen Verhaltens und unabhängig von vorgegebenen Risspfaden zu lokalisieren. Zudem lässt sich die Richtung eines möglichen Rissfortschrittes im Duplexgefüge abschätzen. Dennoch treten bei Verwendung dieser Methode durch den Wegfall ganzer Werkstoffbereiche starke Konvergenzprobleme auf und eine Werkstofftrennung in der austenitischen Phase ließ sich mit diesem Modell bisher nicht abbilden. Ferner kann mit dieser Methode keine scharfe Rissspitze berücksichtigt werden. Hier ermöglicht die „node-release“ Technik eine bessere Kontrolle der Konvergenz sowie die Darstellung einer scharfen Rissspitze und die daraus resultierende Kerbwirkung. Somit erlaubt es das Modell, qualitative Aussagen zu möglichen Versagensszenarien zu treffen. Generell sollte die numerische Simulation der wasserstoffunterstützten Werkstofftrennung unter Betrachtung mehrerer Risspfade erfolgen. Insgesamt sollten beide Methoden zur Simulation der Werkstofftrennungen genutzt werden, um qualitative Aussagen zum möglichen Rissverlauf tätigen zu können.
12. Unabhängig vom verwendeten Modell für die Simulation der Werkstofftrennung und der Beeinflussung der mechanischen Eigenschaften durch Wasserstoff initiieren die Risse immer innerhalb schmaler taillierter Bereiche in der ferritischen Phase, senkrecht zur Belastungsrichtung. Daher stellen schmale taillierte Bereiche in der ferritischen Phase, welche von größeren austenitischen Inseln umgeben und längs zur Belastungsrichtung orientiert sind, risskritische Bereiche im Gefüge dar. Für hohe Wasserstoffkonzentrationen sind große ferritische Bereiche im Duplexgefüge kritische Orte für den Rissfortschritt, da ein schneller Rissfortschritt im  $\delta$ -Ferrit die Beanspruchung in der austenitischen Phase stark erhöht und somit zur schnellen Trennung des Werkstoffes führt. Im Fall der spröden Werkstofftrennung ließen sich zudem im Modell des Realgefüges die Arretierung der Risse im Austenit sowie das Auftreten von Sekundärrissen feststellen, wie es auch in Experimenten häufig beobachtet wird.
13. Die Simulation der spröden Werkstofftrennung im  $\delta$ -Ferrit führt zu einem schnellen Versagen bei geringen makroskopischen Dehnungen. Im duktilen Versagensfall wird mehr Zeit für die vollständige Werkstofftrennung benötigt, das bedeutet, im Gefüge liegen größere Dehnungsreserven vor und für eine vollständige Werkstofftrennung muss makroskopisch eine größere Beanspruchung wirken. Mit zunehmender Versprödung der ferritischen Phase nimmt die maximal erreichte globale Dehnung bis zur vollständigen Werkstofftrennung ab. Das heißt, dass allein durch eine Versprödung der ferritischen Phase makroskopisch eine spröde Werkstofftrennung erfolgen kann. Zumal die lokale Beanspruchung im Gefüge weitaus höher ist als die makroskopische Beanspruchung und bereits initiierte Risse die Beanspruchung lokal erhöhen. Die resultierenden, numerisch ermittelten Verformungen auf den Rissoberflächen korrelieren sehr gut mit den experimentell ermittelten Bruchtopographien wasserstoffbeladener Zugproben aus Duplexstahl.
14. Die Übertragung des makroskopischen mechanischen Verhaltens auf die Phasen des Duplexstahls und umgekehrt ist mit Hilfe des numerischen Modells des Realgefüges möglich und lässt qualitative Aussagen zur Werkstofftrennung unter Einfluss von Wasserstoff zu. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen korrelieren sehr gut mit Ergebnissen aus experimentellen Untersuchungen. Somit lässt sich mit der Simulation der Werkstofftrennung, des Wasserstofftransports und der phasenspezifischen Spannungen

und Dehnungen ein nützlicher Beitrag zum Verständnis für wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigungen in Duplexstählen sowie zur Aufklärung von Schadensursachen leisten. Zudem können experimentelle Ergebnisse besser interpretiert und gegebenenfalls Experimente optimiert werden.

15. Der Einfluss von Wasserstoff auf die mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls wird makroskopisch in der Herabsetzung des plastischen Verformungsvermögens sichtbar. Bedingt durch eine kurze Beladungszeit führen oberflächennah hohe Wasserstoffkonzentrationen zum makroskopisch spröden Versagen im Randbereich und überwiegend duktilem Versagen im Kern der Zugprobe. Dennoch sind auch im Kern Bruchflächen ohne plastische Verformung auszumachen. Ähnliche Ergebnisse sind auch in der Literatur zu finden. Die unterschiedliche Breite des makroskopisch spröden Randbereiches quer und parallel zur Walzrichtung lässt sich über das Wasserstofftransportverhalten erklären und korreliert mit der zügigen Diffusion in Längsrichtung der Gefügeorientierung.
16. Beugungsexperimente sind prinzipiell geeignet, um in-situ den Einfluss von Wasserstoff auf die phasenspezifischen mechanischen Eigenschaften des Duplexstahls zu ermitteln. Bedingt durch die inhomogene Wasserstoffverteilung in der Zugprobe kommt es jedoch zur Überlagerung verschiedener Effekte, die eine eindeutige Aussage für diese Experimente erschweren. Makroskopisch äußerte sich der Einfluss von Wasserstoff in einer Verfestigung. Da aber auch ein hoher Anteil duktiler Verformung vorliegt, ist ein „softening“ nicht auszuschließen, zumal ein „softening“ von den Effekten der Verfestigung verdeckt werden kann [79].
17. Für die Phasenspannungen war ein leichter Anstieg der Dehngrenze in der ferritischen Phase unter Einfluss von Wasserstoff festzustellen. Die makroskopische Rissbildung auf der Oberfläche der Zugprobe führte zu einem Abfall der Spannungen in beiden Phasen. Auch andere Autoren haben solch einen Abfall der Phasenspannungen beobachtet und mit einer Rissbildung assoziiert. Um hier jedoch präzisere Aussagen zum phasenspezifischen mechanischen Verhalten unter Wasserstoff treffen zu können, sollten optimale Randbedingungen für die Experimente gewählt werden, damit sich die Effekte des Wasserstoffs deutlicher abzeichnen.
18. Die Lagerung wasserstoffbeladener Proben aus Duplexstahl in Flüssigstickstoff ließ keine Veränderung der Phasenspannungen erkennen. Daher ist davon auszugehen, dass keine Umlagerung der thermisch bedingten Eigenspannungen erfolgt ist.

Mit der dargestellten Herangehensweise in der numerischen Simulation lassen sich im Rahmen von Prüfketten zur Aufklärung von Schadensursachen und Schadensmechanismen in Duplexwerkstoffen wertvolle Erkenntnisse erzielen. Die Modelle sind in der Lage eine wasserstoffunterstützte Werkstofftrennung abzubilden und die Vorgänge der Werkstofftrennung auf der Mesoebene darzustellen. Mit dem Modell des Realgefüges des Duplexwerkstoffes lassen sich zusammen mit modernen Methoden der Werkstoffcharakterisierung zusätzliche Informationen zum phasenspezifischen mechanischen Verhalten gewinnen.



Um jedoch präzise Aussagen treffen zu können, welche kritischen Kombinationen aus lokaler Beanspruchung und lokaler Wasserstoffkonzentration im entsprechenden Gefüge zu einer Werkstofftrennung führen, muss zunächst eine genauere experimentelle Quantifizierung des mechanischen Verhaltens sowie der Versagenskriterien und lokalen Wasserstoffkonzentration in den Phasen des Duplexstahls erfolgen. Hier kann die numerische Simulation einen entscheidenden Beitrag zur Interpretation experimenteller Ergebnisse leisten.



## 6 Ausblick

Im Zuge der Weiterentwicklung und steigenden Anforderungen an die Wirtschaftlichkeit bei der Verwendung von Duplexstählen wurden in den letzten Jahren die Leanduplexstähle entwickelt und in vielen Bereichen für unterschiedliche Komponenten bereits eingesetzt [44]. Die Leanduplexstähle sind „magere“ Duplexstähle, bei denen der Nickelanteil durch Mangan substituiert wird, was wirtschaftlichen Vorteile mitbringt [1, 2, 44]. In Verbindung mit höheren Gewichtsanteilen an Stickstoff lassen sich gleiche Phasenverhältnisse einstellen wie in den herkömmlichen Duplexstählen [44]. Bedingt durch die veränderte chemische Zusammensetzung haben die austenitische und ferritische Phase des Leanduplex auch andere mechanische als auch Wasserstofftransporteigenschaften. Daraus ergibt sich wiederum ein verändertes Verhalten in der wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung. Im Zuge der Klärung von Schadensmechanismen und zum Vergleich mit herkömmlichen Duplexstählen sollten hier numerisch als auch experimentell die Ermittlung kritischer Bedingungen für eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung erfolgen.

Zukünftig sollte im Modell eine Wasserstoffaufnahme direkt im Risspalt Berücksichtigung finden, wie es zum Beispiel bei der wasserstoffunterstützten Spannungsrissskorrosion auftreten kann. Der so aufgenommene Wasserstoff wirkt direkt an der Risspitze und hat somit einen entscheidenden Einfluss auf den Rissfortschritt im Duplexgefüge.

Weitere Schwerpunkte zukünftiger Untersuchungen sollte die Ermittlung des Einflusses einer martensitischen Umwandlung des Austenits oder spröder intermetallischer Ausscheidungen auf den Rissfortschritt sein. Auch ist zu überprüfen, inwieweit die Gefügemorphologie in Schweißnähten von Duplexstählen die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung beeinflusst.

Zukünftige Modelle sollten eine wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung unabhängig von vordefinierten Risspfaden darstellen können. Hierbei scheint die Herangehensweise aus der Arbeit von Weber [207] unter Nutzung eines Schädigungsparameters bzw. das Modell von Böllinghaus und Hoffmeister [199] als sehr geeignet, da diese Methoden die Nutzung einfach zu ermittelnder Werkstoffparameter erlauben. Voruntersuchungen mit der Element-Elimination-Technique haben gezeigt, dass die Abbildung einer Werkstofftrennung unabhängig von vordefinierten Risspfaden möglich ist. Jedoch bedarf es zusätzliche Erweiterungen des Modells, um die Konvergenzprobleme zu überwinden und eine vollständige Rissbildung auch in der austenitischen Phase abbilden zu können.

Die Modelle sollten generell erweitert werden, um Faktoren wie z.B. Kristalltextur oder orthotrope mechanische Eigenschaften berücksichtigen zu können. Eine dreidimensionale Abbildung des Duplexgefüges würde hierbei unterstützend wirken, da sich dadurch die makroskopische Anisotropie sowie die „load sharing“ Effekte besser abbilden ließen.

Ein grundlegender Aspekt zukünftiger Arbeiten bezüglich der Duplexwerkstoffe sollte jedoch die Quantifizierung von Werkstoffkennwerten sowie Versagenskriterien für die austenitische und ferritische Phase sein. Dazu können die hier verwendeten numerischen Modelle einen wertvollen Beitrag leisten. Zudem lässt sich so auch ermitteln, welches Phasenverhältnis bzw. Verhältnis von weicher zu harter Phase die bestmöglichen makroskopischen mechanischen Eigenschaften hinsichtlich der unterschiedlichen Einsatzbedingungen der Duplexwerkstoffe ergibt.



---

## Literaturverzeichnis

- [1] M. Liljas: 80 years with duplex steels, a historic review and prospects for the future. In: *6th European Stainless Steel Conference*, Helsinki, 2008, S. 535–540
- [2] I. Alvarez-Armas: Duplex Stainless Steels: Brief History and Some Recent Alloys. *Recent Patents on Mechanical Engineering*, Vol. 1 (2008), Nr. 1, S. 51–57
- [3] M. McGuire: *Stainless Steels for Design Engineering*. Ohio, ASM International, 2008, 301 Seiten, ISBN: 978-0-87170-717-8
- [4] M. Knyazeva, M. Pohl: Duplex Steels: Part I: Genesis, Formation, Structure. *Metallography, Microstructure, and Analysis*, Vol. 2 (2013), Nr. 2, S. 113–121
- [5] J. Charles: Duplex stainless steels, a review after DSS'07 in Grado. *Revue de Métallurgie*, Vol. 105 (2008), Nr. 3, S. 155–171
- [6] H. Koch, G. Weiss: Nirosta®-Stähle für Architektur und Bauwesen. *ThyssenKrupp techforum*, (2006), Nr. 2, S. 38–43
- [7] J. Charles, B. Vincent: Duplex stainless steels for chemical tankers. In: *5th World Conference Duplex Stainless Steels*, Maastricht, The Netherlands, KCI Publishing, 1997, S. 727–736
- [8] Deutsche\_BP\_AG: Produkt-Feature-Fotos.
- [9] J. Turner: Future proof: cutting-edge offshore inspection techniques. *Online Article*, (2013), S. 1
- [10] T.S. Taylor, T. Pendlington, R. Bird: Foinaven Super Duplex Materials Cracking Investigation. In: *Offshore Technology Conference*, Houston, Texas, Society of Petroleum Engineers, 1999, S. 467–480
- [11] S. Huizinga, B. McLaughlin, I.M. Hannah, S.J. Paterson, B.N.W. Snedden: Failure of a Subsea Super Duplex Manifold Hub by HISC and Implications for Design. In: *Corrosion*, San Diego, California, USA, NACE International, 2006, S. 9
- [12] T. Böllinghaus: Wasserstoffunterstützte Schäden in metallischen Strukturwerkstoffen. Habilitationsschrift, Helmut-Schmidt-Universität Hamburg, 1999, 500 Seiten
- [13] Z.Y. Liu, C.F. Dong, X.G. Li, Q. Zhi, Y.F. Cheng: Stress corrosion cracking of 2205 duplex stainless steel in H<sub>2</sub>S-CO<sub>2</sub> environment. *Journal of Materials Science*, Vol. 44 (2009), Nr. 16, S. 4228–4234
- [14] A.A. El-Yazgi, D. Hardie: Stress corrosion cracking of duplex and super duplex stainless steels in sour environments. *Corrosion Science*, Vol. 40 (1998), Nr. 6, S. 909–930
- [15] S.-L. Chou, W.-T. Tsai: Hydrogen embrittlement of duplex stainless steel in concentrated sodium chloride solution. *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 60 (1999), Nr. 2, S. 137–142

- [16] F. Zucchi, V. Grassi, C. Monticelli, G. Trabanelli: Hydrogen embrittlement of duplex stainless steel under cathodic protection in acidic artificial sea water in the presence of sulphide ions. *Corrosion Science*, Vol. 48 (2006), Nr. 2, S. 522–530
- [17] S. Roychowdhury, V. Kain: Embrittlement of a Duplex Stainless Steel in Acidic Environment Under Applied Cathodic Potentials. *Journal of Materials Engineering and Performance*, Vol. 17 (2008), Nr. 5, S. 702–707
- [18] P. Woollin, A. Gregori: Avoiding Hydrogen Embrittlement Stress Cracking of Ferritic Austenitic Stainless Steels Under Cathodic Protection. In: *23rd International Conference on Offshore Mechanics and Arctic Engineering, Volume 2*, ASME, 2004, S. 777–784
- [19] C. San Marchi, B.P. Somerday, J. Zelinski, X. Tang, G.H. Schiroky: Mechanical Properties of Super Duplex Stainless Steel 2507 after Gas Phase Thermal Precharging with Hydrogen. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 38 (2007), Nr. 11, S. 2763–2775
- [20] T. Michler, J. Naumann: Microstructural aspects upon hydrogen environment embrittlement of various bcc steels. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35 (2010), Nr. 2, S. 821–832
- [21] K.H. Lo, C.H. Shek, J.K.L. Lai: Recent developments in stainless steels. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, Vol. 65 (2009), Nr. 4-6, S. 39–104
- [22] V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen: Modelling of hydrogen diffusion and hydrogen induced cracking in supermartensitic and duplex stainless steels. *Materials & Design*, Vol. 29 (2008), Nr. 10, S. 1934–1948
- [23] W. Brocks, R. Falkenberg, I. Scheider: Coupling aspects in the simulation of hydrogen-induced stress-corrosion cracking. *Procedia IUTAM*, Vol. 3 (2012), S. 11–24
- [24] P. Wongpanya, T. Boellinghaus, G. Lothongkum, H. Hoffmeister: Numerical Modelling of Cold Crack Initiation and Propagation in S 1100 QL Steel Root Welds. *Welding in the World*, Vol. 53 (2009), Nr. 3/4, S. R34–R43
- [25] E. Viyanit: Numerical Simulation of Hydrogen Assisted Cracking in Supermartensitic Stainless Steel Welds. Dissertation, Helmut-Schmidt-Universität Hamburg, 2005, 229 Seiten
- [26] O. Hammar, U. Svensson: Influence of steel composition on segregation and microstructure during solidification of austenitic stainless steels. In: *Solidification of Casting and Metals*, London, Metals Society, 1979, S. 401–410
- [27] J.-O. Nilsson: Super duplex stainless steels. *Materials Science and Technology*, Vol. 8 (1992), Nr. 8, S. 685–700
- [28] M. Pohl: The Ferrite / Austenite Ratio of Duplex Stainless Steel. *Zeitschrift für Metallkunde*, Vol. 86 (1995), Nr. 2, S. 97–102
- [29] T. Kuroda: Role of Sigma Phase on Hydrogen Embrittlement of Super Duplex. *Transactions of JWRI*, Vol. 34 (2005), Nr. 2, S. 63–68

- [30] M. Pohl, O. Storz, T. Glogowski: Effect of intermetallic precipitations on the properties of duplex stainless steel. *Materials Characterization*, Vol. 58 (2007), Nr. 1, S. 65–71
- [31] G. Fargas, M. Anglada, a. Mateo: Effect of the annealing temperature on the mechanical properties, formability and corrosion resistance of hot-rolled duplex stainless steel. *Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 209 (2009), Nr. 4, S. 1770–1782
- [32] F. Iacoviello, M. Habashi, M. Cavallini: Hydrogen embrittlement in the duplex stainless steel Z2CND2205 hydrogen-charged at 200°C. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 224 (1997), Nr. 1-2, S. 116–124
- [33] M. Sozańska, K. Kłyk-Spyra: Investigation of hydrogen induced cracking in 2205 duplex stainless steel in wet H<sub>2</sub>S environments after isothermal treatment at 675, 750 and 900°C. *Materials Characterization*, Vol. 56 (2006), Nr. 4-5, S. 399–404
- [34] J.R. Saithala, S. Mahajanam, H.S. Ubhi, J. Atkinson: Environmental Assisted Cracking Behavior of Sigmatized Super Duplex Stainless Steel in Oilfield Production Brine. *Corrosion*, Vol. 69 (2013), Nr. 3, S. 276–285
- [35] W.B. Hutchinson, K. Ushioda, G. Runnsjö: Anisotropy of tensile behaviour in a duplex stainless steel sheet. *Materials Science and Technology*, Vol. 1 (1985), Nr. 9, S. 728–736
- [36] J. Johansson, M. Odén, X.-H. Zeng: Evolution of the residual stress state in a duplex stainless steel during loading. *Acta Materialia*, Vol. 47 (1999), Nr. 9, S. 2669–2684
- [37] J.J. Moverare, M. Odén: Influence of elastic and plastic anisotropy on the flow behavior in a duplex stainless steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 33 (2002), Nr. 1, S. 57–71
- [38] K. Manikanda Subramanian, P. Chandramohan, B. Ravisankar: Influence of Texture on the Mechanical Properties of Hot Rolled Duplex Stainless Steels. *Transactions of the Indian Institute of Metals*, Vol. 64 (2011), Nr. 6, S. 519–534
- [39] P. Hedström, L.E. Lindgren, J. Almer, U. Lienert, J. Bernier, M. Terner, M. Odén: Load Partitioning and Strain-Induced Martensite Formation during Tensile Loading of a Metastable Austenitic Stainless Steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 40 (2009), Nr. 5, S. 1039–1048
- [40] A. Sharrfeddin, S.M. Musa, F.M. Elshawesh: Role of structural orientation on the susceptibility of 2205 duplex stainless steel to hydrogen embrittlement. In: *2nd International Advances in Applied Physics and Materials Science Congress*, M.H. Aslan, A.Y. Oral (Ed.), Antalya, Turkey, American Institute of Physics, 2012, S. 199–203
- [41] A. Mateo, L. Llanes, N. Akdut, J. Stolarz, M. Anglada: Anisotropy effects on the fatigue behaviour of rolled duplex stainless steels. *International Journal of Fatigue*, Vol. 25 (2003), Nr. 6, S. 481–488

- [42] J. Alsarraf: Hydrogen Embrittlement Susceptibility of Super Duplex Stainless Steels. PhD Thesis, Cranfield University, 2010, 250 Seiten
- [43] TMR\_Stainless: Verarbeitung nichtrostender Duplexstähle – Ein praktischer Leitfaden. London, 2011, 64 Seiten
- [44] E.M. Westin: Microstructure and properties of welds in the lean duplex stainless steel LDX 2101 ®. Doctoral Thesis, Royal Institute of Technology, 2010, 72 Seiten
- [45] T. Ogawa, T. Koseki: Effect of Composition Profiles on Metallurgy and Corrosion Behavior of Duplex Stainless Steel Weld Metals. *Welding Journal Research Supplement*, Vol. 68 (1989), Nr. 5, S. 181s–191s
- [46] I. Varol, J.C. Lippold, W.A. Baeslack: Welding of Duplex Stainless Steels. *Key Engineering Materials*, Vol. 69-70 (1992), S. 217–252
- [47] C.A. Clark, P. Guha: Improvements in corrosion resistance, mechanical properties, and weldability of duplex austenitic/ferritic steels. *Materials and Corrosion/Werkstoffe und Korrosion*, Vol. 34 (1983), Nr. 1, S. 27–31
- [48] M. Dollar, S. Gorczyca: Effect of grain size on work hardening in austenitic–ferritic steel. *Metal Science*, Vol. 17 (1983), Nr. 9, S. 439–444
- [49] S. Floreen, H.W. Hayden: The Influence of Austenite and Ferrite on the Mechanical Properties of Two-Phase Stainless Steels Having Microduplex Structures. *Transactions of ASM*, Vol. 61 (1968), S. 489–499
- [50] I. Tamura, Y. Tomoto, A. Akao, Y. Yamaoka, M. Ozawa, S. Kanatani: On the Strength and Ductility of Two-phase Iron Alloys. *Transactions of the Iron and Steel Institute of Japan*, Vol. 13 (1973), S. 283–292
- [51] J. Foct, N. Akdut: Cleavage-like fracture of austenite in duplex stainless steel. *Scripta Metallurgica et Materialia*, Vol. 29 (1993), Nr. 2, S. 153–158
- [52] W. Horvath, B. Tabernig, E. Werner, P. Uggowitzer: Microstructures and yield strength of nitrogen alloyed super duplex steels. *Acta Materialia*, Vol. 45 (1997), Nr. 4, S. 1645–1654
- [53] E.O. Hall: The Deformation and Ageing of Mild Steel: III Discussion of Results. *Proceedings of the Physical Society. Section B*, Vol. 64 (1951), Nr. 9, S. 747–753
- [54] V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen, E. Østby, T. Berstad: Influence of hydrogen from cathodic protection on the fracture susceptibility of 25%Cr duplex stainless steel – Constant load SENT testing and FE-modelling using hydrogen influenced cohesive zone elements. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 76 (2009), Nr. 7, S. 827–844
- [55] P. Domzalicki, E. Lunarska, J. Birn: Effect of cathodic polarization and sulfate reducing bacteria on mechanical properties of different steels in synthetic sea water. *Materials and Corrosion/Werkstoffe und Korrosion*, Vol. 58 (2007), Nr. 6, S. 413–421
- [56] S. Harjo, Y. Tomota, M. Ono: Measurements of thermal residual elastic strains in ferrite–austenite Fe–Cr–Ni alloys by neutron and X-ray diffractions. *Acta Materialia*, Vol. 47 (1998), Nr. 1, S. 353–362



- [57] S. Harjo, Y. Tomota, P. Lukáš, D. Neov, M. Vrána, P. Mikula, M. Ono: In situ neutron diffraction study of  $\alpha$ - $\gamma$  Fe-Cr-Ni alloys under tensile deformation. *Acta Materialia*, Vol. 49 (2001), Nr. 13, S. 2471–2479
- [58] R. Dakhlaoui, C. Braham, A. Baczmanski: Mechanical properties of phases in austeno-ferritic duplex stainless steel—Surface stresses studied by X-ray diffraction. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 444 (2007), Nr. 1-2, S. 6–17
- [59] R. Dakhlaoui, A. Baczmański, C. Braham, S. Wroński, K. Wierzbowski, E.C. Oliver: Effect of residual stresses on individual phase mechanical properties of austeno-ferritic duplex stainless steel. *Acta Materialia*, Vol. 54 (2006), Nr. 19, S. 5027–5039
- [60] J. Nilsson, G. Chai: The physical metallurgy of duplex stainless steels. In: *International Conference & Expo Duplex 2007*, Gardo, Italien, Associazione Italiana di Metallurgia, 2007, S. 73–82
- [61] M.-C. Marinelli, A. El Bartali, J.W. Signorelli, P. Evrard, V. Aubin, I. Alvarez-Armas, S. Degallaix-Moreuil: Activated slip systems and microcrack path in LCF of a duplex stainless steel. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 509 (2009), Nr. 1-2, S. 81–88
- [62] P. Hedström, T.-S. Han, U. Lienert, J. Almer, M. Odén: Load partitioning between single bulk grains in a two-phase duplex stainless steel during tensile loading. *Acta Materialia*, Vol. 58 (2010), Nr. 2, S. 734–744
- [63] R.L. Peng, J. Gibmeier, G.C. Chai, S. Johansson: Load Partitioning in a Duplex stainless steel with surface strength gradient and residual stresses. In: *Advances in X-ray Analysis*, Denver, International Centre for Diffraction Data, 2008, S. 773–780
- [64] R.L. Peng, J. Gibmeier, S. Eulert, S. Johansson, G.C. Chai: In Situ X-Ray Diffraction Study of Load Partitioning and Microyielding for the Super Duplex Stainless Steel SAF2507 (UNS S32750). *Materials Science Forum*, Vol. 524-525 (2006), S. 847–852
- [65] T. Siegmund, E. Werner, F.D. Fischer: The irreversible deformation of a duplex stainless steel under thermal cycling. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 169 (1993), Nr. 1-2, S. 125–134
- [66] J. Gurland: An Estimate of Contact and Continuity of Dispersions in Opaque Samples. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, Vol. 236 (1966), Nr. 5, S. 642–646
- [67] K. Cho, J. Gurland: The law of mixtures applied to the plastic deformation of two-phase alloys of coarse microstructures. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 19 (1988), Nr. 8, S. 2027–2040
- [68] H. Fischmeister, B. Karlsson: Plastizitätseigenschaften grob-zweiphasiger Werkstoffe. *Zeitschrift für Metallkunde*, Vol. 68 (1977), Nr. 5, S. 311–327

- [69] S. Ankem, H. Margolin, C. Greene, B. Neuberger, P. Oberson: Mechanical properties of alloys consisting of two ductile phases. *Progress in Materials Science*, Vol. 51 (2006), Nr. 5, S. 632–709
- [70] T. Siegmund: On the thermomechanical deformation behavior of duplex-type materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 43 (1995), Nr. 4, S. 495–532
- [71] T. Eutebach, A. Ibach, M. Pohl: Modellierung eines ferritisch-austenitischen Duplex-Stahls. *Praktische Metallographie, Sonderband*, Vol. 21 (2000), S. 153–158
- [72] B. Liao, C. Zhang, J. Wu, D. Cai, C. Zhao, X. Ren, Q. Yang: Numerical simulation of the stress–strain curve of duplex weathering steel. *Materials & Design*, Vol. 29 (2008), Nr. 2, S. 562–567
- [73] A. El Bartali, P. Evrard, V. Aubin, S. Herenú, I. Alvarez-Armas, A.F. Armas, S. Degallaix-Moreuil: Strain heterogeneities between phases in a duplex stainless steel. Comparison between measures and simulation. *Procedia Engineering*, Vol. 2 (2010), Nr. 1, S. 2229–2237
- [74] P. Evrard, a. El Bartali, V. Aubin, C. Rey, S. Degallaix, D. Kondo: Influence of boundary conditions on bi-phased polycrystal microstructure calculation. *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47 (2010), Nr. 16, S. 1979–1986
- [75] T.-P. Perng, C.J. Altstetter: Cracking kinetics of two-phase stainless steel alloys in hydrogen gas. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 19 (1988), Nr. 1, S. 145–152
- [76] R.A. Oriani: Hydrogen Embrittlement of Steels. *Annual Review of Materials Science*, Vol. 8 (1978), Nr. 1, S. 327–357
- [77] J.P. Hirth: Effects of hydrogen on the properties of iron and steel. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 11 (1980), Nr. 6, S. 861–890
- [78] M.R. Louthan: Hydrogen Embrittlement of Metals: A Primer for the Failure Analyst. *Journal of Failure Analysis and Prevention*, Vol. 8 (2008), Nr. 3, S. 289–307
- [79] S.P. Lynch: Progress Towards Understanding Mechanisms Of Hydrogen Embrittlement And Stress Corrosion Cracking. In: *Corrosion - Conference and Expo*, Nashville, Tennessee, NACE International, 2007, S. 1694–1748
- [80] E. Riecke, B. Johnen, H.J. Grabke: Einflüsse von Legierungselementen auf die Korrosion und Wasserstoffaufnahme von Eisen in Schwefelsäure - Teil I: Permeation, Diffusion und Löslichkeit von Wasserstoff in binären Eisenlegierungen. *Materials and Corrosion/Werkstoffe und Korrosion*, Vol. 36 (1985), Nr. 10, S. 435–441
- [81] A. Pundt: Nanoskalige Metall-Wasserstoff-Systeme. Dissertation, Universitätsverlag Göttingen, 2005, 155 Seiten
- [82] M. Uhlemann: Wasserstofftransport und Bindungszustände von Wasserstoff in kubisch-flächenzentrierten Stählen und Nickel-Basislegierungen. Dissertation, Technische Universität Dresden, 1998, 136 Seiten

- [83] S.C. Mamani: Study of Hydrogen Permeation and Diffusion in Steels: Predictive Model for Determination of Desorbed Hydrogen Concentration. Master Thesis, University of Puerto Rico, 2005
- [84] H. Pircher, R. Großterlinden: Wasserstoffinduzierte Korrosion von niedriglegierten Stählen in wässrigen Medien. *Materials and Corrosion/Werkstoffe und Korrosion*, Vol. 38 (1987), Nr. 2, S. 57–64
- [85] W. Drodten: Einfluss von Wasserstoff bei der Verarbeitung und Anwendung metallischer Werkstoffe. *Galvanotechnik*, Vol. 8 (2003), S. 1921–1926
- [86] R.D. McCright: Effects of Environmental Species and Metallurgical Structure on Hydrogen Entry Into Steel. In: *Stress Corrosion Cracking and Hydrogen Embrittlement of Iron Base Alloys*, R.W. Staehle, J. Hochmann, R.D. McCright, J.E. Slater (Ed.), Unieux-Firminy, National Association of Corrosion Engineers, 1973, S. 306–325
- [87] A. Sieverts: Die Aufnahme von Gasen durch Metalle. *Zeitschrift für Metallkunde*, Vol. 21 (1929), Nr. 2, S. 37–46
- [88] T.J. Carter, L.A. Cornish: Hydrogen in metals. *Engineering Failure Analysis*, Vol. 8 (2001), Nr. 2, S. 113–121
- [89] A. Turnbull, E. Lembach-Beylegaard, R.B. Hutchings: Hydrogen transport in duplex stainless steels. In: *Fourth International Conference Duplex Stainless Steels*, T. Gooch (Ed.), Glasgow, Scotland, Woodhead Publishing Ltd in association with The Welding Institute, 1994
- [90] K. Ogawa, M. Miura: Hydrogen cracking in duplex stainless steel weldments. *Welding International*, Vol. 5 (1991), Nr. 9, S. 691–696
- [91] S.A. Gedeon, T.W. Eagar: Thermochemical Analysis of Hydrogen Absorption in Welding. *Welding Journal, Research Supplement*, Vol. 69 (1990), Nr. 7, S. 264s–271s
- [92] S.L. Amey, G.M. Michal, J.H. Payer: Modeling hydrogen entry and exit in metals exposed to multiple charging processes. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 25 (1994), Nr. 4, S. 723–731
- [93] R. Oriani: The diffusion and trapping of hydrogen in steel. *Acta Metallurgica*, Vol. 18 (1970), Nr. 1, S. 147–157
- [94] Ø. Grong: Metallurgical Modelling of Welding. Maney Publishing, 1997, ISBN: 978-0-901716-37-8
- [95] C. Minot, C. Demangeat: The iron–hydrogen system: Lattice location of hydrogen, heat of formation, and hydrogen–hydrogen binding energy. *Journal of Chemical Physics*, Vol. 86 (1987), Nr. 4, S. 2161
- [96] A. San-Martin, F.D. Manchester: The Fe-H (Iron-Hydrogen) system. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, Vol. 11 (1990), Nr. 2, S. 173–184

- [97] Y. Fukai: The Metal-Hydrogen System. Berlin, Heidelberg, Springer-Verlag, 2005, 500 Seiten, ISBN: 978-3-540-28883-1
- [98] R.A. Oriani: The Physical and Metallurgical Aspects of Hydrogen in Metals. In: *Fourth International Conference on Cold Fusion*, Lahaina, Maui, Hawaii, Electric Power Research Institute, 1993, S. Vol. 1, Paper 18–1
- [99] B. Baranowski: Metal-Hydrogen Systems at High Hydrogen Pressures. In: *Hydrogen in Metals II*, G. Alefeld, J. Völkl (Ed.), Springer-Verlag, 1978, S. 157–200
- [100] T. Mütschele, R. Kirchheim: Hydrogen as a probe for the average thickness of a grain boundary. *Scripta Metallurgica*, Vol. 21 (1987), Nr. 8, S. 1101–1104
- [101] U. Draugelates, A. Schram, C.C. Kedenburg: Wasserstoffaufnahme im Tropfenstadium beim Metall-Schutzgasschweißen von niedriglegierten Feinkornbaustählen. *Schweißen & Schneiden*, Vol. 49 (1997), Nr. 9, S. 693–699
- [102] P.H.M. Hart, G.M. Evans: Hydrogen Content of Single and Multipass Steel Welds. *Welding Journal, Research Supplement*, Vol. 76 (1997), Nr. 2, S. 74s–80s
- [103] T. Böllinghaus: Zur Bestimmung risskritischer Schrumpfbinderungen und Wasserstoffverteilungen in Schweißverbindungen durch numerische Simulationen. Dissertation, Helmut-Schmidt-Universität Hamburg, 1995, 175 Seiten
- [104] H. Mehrer: Diffusion in Solids. Berlin, Heidelberg, Springer Verlag, 2007, ISBN: 978-3-540-71486-6
- [105] J. Völkl, G. Alefeld: Diffusion of Hydrogen in Metals. In: *Hydrogen in Metals I*, G. Alefeld, J. Völkl (Ed.), Springer Verlag, 1978, S. 321–348
- [106] A. Turnbull, R.B. Hutchings: Analysis of hydrogen atom transport in a two-phase alloy. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 177 (1994), Nr. 1-2, S. 161–171
- [107] E. Owczarek, T. Zakroczymski: Hydrogen transport in a duplex stainless steel. *Acta Materialia*, Vol. 48 (2000), Nr. 12, S. 3059–3070
- [108] D. Yang, K. Chasse, P.M. Singh: Stress and Environmental Factors Affecting Stress Corrosion Cracking of Duplex Stainless Steels in White Liquor Environments. In: *TAPPI Engineering, Pulping, Environmental Conference*, Memphis, Tennessee, 2009, S. 19
- [109] S.S. Chen, T.I. Wu, J.K. Wu: Effects of deformation on hydrogen degradation in a duplex stainless steel. *Journal of Materials Science*, Vol. 39 (2004), Nr. 1, S. 67–71
- [110] W.C. Luu, P.W. Liu, J.K. Wu: Hydrogen transport and degradation of a commercial duplex stainless steel. *Corrosion Science*, Vol. 44 (2002), Nr. 8, S. 1783–1791
- [111] J. Ovejero-García, P.A. Pesada: Hydrogen microprint technique in the study of hydrogen in steels. *Journal of Materials Science*, Vol. 20 (1985), Nr. 7, S. 2623–2629
- [112] S. Brauser, T. Kannengiesser: Hydrogen absorption of different welded duplex steels. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35 (2010), Nr. 9, S. 4368–4374

- [113] R.A. Walker, T.G. Gooch: Hydrogen cracking of welds in duplex stainless steel. In: *International Conference on Duplex Stainless Steel, Les editions de physique, J. Charles (Ed.), Beaun, Frankreich, 1991, S. 1053–1063*
- [114] K. Beyer, S. Brauser, T. Kannengießler: Trägergas-Heißextraktion zur Analyse der Wasserstoffeinlagerung und -effusion in Duplexgefügen. In: *Tagung Werkstoffprüfung, M. Pohl (Ed.), Neu-Ulm, Deutsche Gesellschaft für Materialkunde, 2010*
- [115] E. Dabah, T. Kannengiesser, T. Mente, K. Beyer, S. Brauser: Quantification of hydrogen effective diffusion coefficients and effusion behavior in duplex stainless steel weld metals. *Welding in the World*, Vol. 57 (2013), Nr. 4, S. 561–567
- [116] G.M. Pressouyre: A classification of hydrogen traps in steel. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 10 (1979), Nr. 10, S. 1571–1573
- [117] A. McNabb, P.K. Foster: A New Analysis of the Diffusion of Hydrogen in Iron and Ferritic Steels. *Transactions of the Metallurgical Society of AIME*, Vol. 227 (1963), Nr. 6, S. 618–627
- [118] R.B. McLellan: Thermodynamics and diffusion behavior of interstitial solute atoms in non-perfect solvent crystals. *Acta Metallurgica*, Vol. 27 (1979), Nr. 10, S. 1655–1663
- [119] I. Maroef, D.L. Olson, M. Eberhart, G.R. Edwards: Hydrogen trapping in ferritic steel weld metal. *International Materials Reviews*, Vol. 47 (2002), Nr. 4, S. 191–223
- [120] A.H. Cottrell, B.A. Bilby: Dislocation Theory of Yielding and Strain Ageing of Iron. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, Vol. 62 (1949), Nr. 1, S. 49–62
- [121] J. Tien, A.W. Thompson, I.M. Bernstein, R.J. Richards: Hydrogen transport by dislocations. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 7 (1976), Nr. 6, S. 821–829
- [122] T. Boellinghaus, H. Hoffmeister, A. Dangeleit: A scatterband for hydrogen diffusion coefficients in micro-alloyed and low carbon structural steels. *Welding in the World*, Vol. 35 (1995), Nr. 2, S. 83–96
- [123] I. Kaur, Y. Mishin, W. Gust: Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. West Sussex, John Wiley & Sons Ltd, 1995, 512 Seiten, ISBN: 0-471-93819-X
- [124] A. Oudriss, J. Creus, J. Bouhattate, E. Conforto, C. Berziou, C. Savall, X. Feaugas: Grain size and grain-boundary effects on diffusion and trapping of hydrogen in pure nickel. *Acta Materialia*, Vol. 60 (2012), Nr. 19, S. 6814–6828
- [125] N. Yazdipour, D.P. Dunne, E. V. Pereloma: Effect of Grain Size on the Hydrogen Diffusion Process in Steel Using Cellular Automaton Approach. *Materials Science Forum*, Vol. 706-709 (2012), S. 1568–1573
- [126] N. Yazdipour, a. J. Haq, K. Muzaka, E.V. Pereloma: 2D modelling of the effect of grain size on hydrogen diffusion in X70 steel. *Computational Materials Science*, Vol. 56 (2012), S. 49–57

- [127] M. Dadfarnia, P. Sofronis, I. Robertson, B.P. Somerday, G. Muralidharan, D. Stalheim: Numerical Simulation of Hydrogen Transport at a Crack Tip in a Pipeline Steel. In: *Materials and Joining; Pipeline Automation and Measurement; Risk and Reliability, Volume 3, Parts A and B*, Calgary, Alberta, Canada, ASME, 2006, S. 193–199
- [128] S. Chou, W. Tsai: Effect of grain size on the hydrogen-assisted cracking in duplex stainless steels. *Materials Science and Engineering A*, Vol. 270 (1999), Nr. 2, S. 219–224
- [129] G.M. Pressouyre, I.M. Bernstein: A quantitative analysis of hydrogen trapping. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 9 (1978), Nr. 11, S. 1571–1580
- [130] M.F. Stevens, I.M. Bernstein: Microstructural trapping effects on hydrogen induced cracking of a microalloyed steel. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 20 (1989), Nr. 5, S. 909–919
- [131] E. Riecke, B. Johnen, H. Liesegang, A. Thoms, B. Reynders, H.J. Grabke: Einflüsse von Mo, V, Nb, Ti, Zr und deren Karbiden auf die Korrosion und Wasserstoffaufnahme des Eisens in Schwefelsäure. *Materials and Corrosion/Werkstoffe und Korrosion*, Vol. 39 (1988), Nr. 11, S. 525–533
- [132] H.K. Yalçı, D.V. Edmonds: Application of the hydrogen microprint and the microautoradiography techniques to a duplex stainless steel. *Materials Characterization*, Vol. 34 (1995), Nr. 2, S. 97–104
- [133] T. Boellinghaus, H. Hoffmeister, C. Middel: Scatterbands for hydrogen diffusion coefficients in steel having a ferritic or martensitic microstructure and steels having an austenitic microstructure at room temperature. *Welding in the World*, Vol. 37 (1996), Nr. 1, S. 16–23
- [134] J. Leblond, D. Dubois: A general mathematical description of hydrogen diffusion in steels-I. Derivation of diffusion equations from boltzmann-type transport equations. *Acta Metallurgica*, Vol. 31 (1983), Nr. 10, S. 1459–1469
- [135] H.J. Grabke, E. Riecke: Absorption and Diffusion of Hydrogen in Steel. *Materiali in Tehnologije/Materials and Technology*, Vol. 34 (2000), Nr. 6, S. 331–342
- [136] R.K. Wilson, E.C. Aifantis: On the Theory of Stress-Assisted Diffusion , I. *Acta Mechanica*, Vol. 45 (1982), Nr. 3-4, S. 273–296
- [137] D.J. Unger, E.C. Aifantis: On the theory of stress-assisted diffusion, II. *Acta Mechanica*, Vol. 47 (1983), Nr. 1-2, S. 117–151
- [138] R. Kirchheim: Interaction of hydrogen with external stress fields. *Acta Metallurgica*, Vol. 34 (1986), Nr. 1, S. 37–42
- [139] R.W. Balluffi, A.L. Ruoff: On Strain-Enhanced Diffusion in Metals. I. Point Defect Models. *Journal of Applied Physics*, Vol. 34 (1963), Nr. 6, S. 1634
- [140] A.L. Ruoff, R.W. Balluffi: Strain-Enhanced Diffusion in Metals. II. Dislocation and Grain-Boundary Short-Circuiting Models. *Journal of Applied Physics*, Vol. 34 (1963), Nr. 7, S. 1848

- [141] A.L. Ruoff, R.W. Balluffi: On Strain-Enhanced Diffusion in Metals. III. Interpretation of Recent Experiments. *Journal of Applied Physics*, Vol. 34 (1963), Nr. 9, S. 2862
- [142] S. Piekarski: Stress-Assisted Diffusion and the Modified Fick Law. *Journal of Technical Physics*, Vol. 46 (2005), Nr. 1, S. 3–7
- [143] A. Troiano: The Role Of Hydrogen and other Interstitials in the mechanical Behavior of Metals. *Transactions of ASM*, Vol. 52 (1960), S. 54–80
- [144] K. Kiuchi, R. McLellan: The solubility and diffusivity of hydrogen in well-annealed and deformed iron. *Acta Metallurgica*, Vol. 31 (1983), Nr. 7, S. 961–984
- [145] M.R. Louthan, G.R. Caskey, J.A. Donovan, D.E. Rawl: Hydrogen embrittlement of metals. *Materials Science and Engineering*, Vol. 10 (1972), S. 357–368
- [146] R. Oltra, C. Bouillot: Experimental investigation of the role of hydrogen in stress corrosion cracking of duplex stainless steel. In: *Hydrogen Transport & Cracking in Metals*, A. Turnbull (Ed.), Teddington, UK, The Institute of Materials, 1994, S. 17–27
- [147] R. Oltra, C. Bouillot, T. Magnin: Localized hydrogen cracking in the austenitic phase of a duplex stainless steel. *Scripta Materialia*, Vol. 35 (1996), Nr. 9, S. 1101–1105
- [148] H. Birnbaum, P. Sofronis: Hydrogen-Enhanced Localized Plasticity-A Mechanism for Hydrogen-Related Fracture. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 176 (1994), Nr. 1-2, S. 191–202
- [149] I. Robertson: The effect of hydrogen on dislocation dynamics. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 68 (2001), Nr. 6, S. 671–692
- [150] P. Sofronis, H.K. Birnbaum: Mechanics of the hydrogen-dislocation-impurity interactions-I. Increasing shear modulus. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 43 (1995), Nr. 1, S. 49–90
- [151] P. Sofronis, R. McMeeking: Numerical analysis of hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 37 (1989), Nr. 3, S. 317–350
- [152] A.H.M. Krom, R.W.J. Koers, A. Bakker: Hydrogen transport near a blunting crack tip. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 47 (1999), Nr. 4, S. 971–992
- [153] Y. Liang, P. Sofronis: Micromechanics and numerical modelling of the hydrogen–particle–matrix interactions in nickel-base alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 11 (2003), Nr. 4, S. 523–551
- [154] P. Novak, R. Yuan, B.P. Somerday, P. Sofronis, R.O. Ritchie: A statistical, physical-based, micro-mechanical model of hydrogen-induced intergranular fracture in steel. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 58 (2010), Nr. 2, S. 206–226
- [155] D.C. Ahn, P. Sofronis, R. Dodds: Modeling of hydrogen-assisted ductile crack propagation in metals and alloys. *International Journal of Fracture*, Vol. 145 (2007), Nr. 2, S. 135–157
- [156] R. Miresmaeili, M. Ogino, T. Nakagawa, H. Kanayama: A coupled elastoplastic-transient hydrogen diffusion analysis to simulate the onset of necking in tension by

- using the finite element method. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35 (2010), Nr. 3, S. 1506–1514
- [157] A. Barnoush, H. Vehoff: In situ electrochemical nanoindentation: A technique for local examination of hydrogen embrittlement. *Corrosion Science*, Vol. 50 (2008), Nr. 1, S. 259–267
- [158] I. Kaur, W. Gust, L. Kozma: Handbook of grain and interphase boundary diffusion data, Volume 1. Ziegler Press, 1989, 730 Seiten
- [159] E. Dabah, V. Lisitsyn, D. Eliezer: Performance of hydrogen trapping and phase transformation in hydrogenated duplex stainless steels. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 527 (2010), Nr. 18-19, S. 4851–4857
- [160] W. Zheng, D. Hardie: The effect of hydrogen on the fracture of a commercial duplex stainless steel. *Corrosion Science*, Vol. 32 (1991), Nr. 1, S. 23–36
- [161] A. Głowacka, M.J. Woźniak, G. Nolze, W.A. Świątnicki: Hydrogen induced phase transformations in austenitic-ferritic steel. *Solid State Phenomena*, Vol. 112 (2006), S. 133–140
- [162] S.S.M. Tavares, M.R. da Silva, J.M. Pardal, H.F.G. Abreu, A.M. Gomes: Microstructural changes produced by plastic deformation in the UNS S31803 duplex stainless steel. *Journal of Materials Processing Technology*, Vol. 180 (2006), Nr. 1-3, S. 318–322
- [163] A. Głowacka, M.J. Woźniak, W.A. Świątnicki: AFM study of austeno-ferritic stainless steel microstructure after cathodic hydrogen charging. *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 404-406 (2005), S. 595–598
- [164] A.J. Griffiths, A. Turnbull: On the effective diffusivity of hydrogen in low alloy steels. *Corrosion Science*, Vol. 37 (1995), Nr. 11, S. 1879–1881
- [165] M. Dadfarnia, P. Novak, D.C. Ahn, J.B. Liu, P. Sofronis, D.D. Johnson, I.M. Robertson: Recent advances in the study of structural materials compatibility with hydrogen. *Advanced materials (Deerfield Beach, Fla.)*, Vol. 22 (2010), Nr. 10, S. 1128–35
- [166] F. Straub, T. Boellinghaus, W. Unger, T. Mente: In-situ detection of Deuterium in duplex stainless steels by time-of-flight secondary ion mass spectrometry (TOF-SIMS). In: *Hydrogen-materials interactions - Proceedings of the International Hydrogen Conference (IHC 2012)*, P. Sofronis, B.P. Somerday (Ed.), Moran, Wyoming, USA, ASME, 2014, S. 505–512
- [167] A. Griesche, E. Dabah, N. Kardjilov, A. Hilger, I. Manke, T. Kannengiesser: Imaging of hydrogen in steels using neutrons. *International Journal of Materials Research*, Vol. online fir (2014), S. 140530091139004
- [168] E. Dabah, A. Griesche, K. Beyer, E. Solórzano, T. Kannengiesser: In Situ Measurements of Hydrogen Diffusion in Duplex Stainless Steels by Neutron Radiography. In: *In-situ Studies with Photons, Neutrons and Electrons Scattering II*,



- T. Kannengiesser, Y. Komizo, S.S. Babu, A.J. Ramirez (Ed.), Springer Verlag, 2014, S. 155–163
- [169] E. Dabah, T. Kannengiesser, D. Eliezer, T. Boellinghaus: Hydrogen Interaction with Residual Stresses in Steel Studied by Synchrotron X-Ray Diffraction. *Materials Science Forum*, Vol. 772 (2013), S. 91–95
- [170] H.-J. König, K.W. Lange: Modellvorstellungen zum Wasserstofftransport aus Eisen unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen von Gasen mit Metalloberflächen. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, Vol. 46 (1975), Nr. 4, S. 237–243
- [171] H.-J. König, K.W. Lange: Experimentelle Überprüfung des Einflusses des Grenzflächenzustandes auf die Ermittlung des Diffusionskoeffizienten des Wasserstoffs in Eisenlegierungen. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, Vol. 46 (1975), Nr. 4, S. 269–275
- [172] R. Song, S.-I. Pyun, R.A. Oriani: Hydrogen Permeation Through the Passivation Film on Iron by Time-lag Method. *Corrosion Science*, Vol. 137 (1990), Nr. 6, S. 1703–1706
- [173] P. Bruzzioni, R. Garavaglia: Anodic iron oxide films and their effect on the hydrogen permeation through steel. *Corrosion Science*, Vol. 34 (1993), Nr. 10, S. 1751–1752
- [174] P.R. Pobinger: Effusionsverhalten des Wasserstoffs an der Grenzfläche Stahl/Luft. *Archiv für das Eisenhüttenwesen*, Vol. 42 (1971), Nr. 9, S. 663–669
- [175] C.A. Zapffe, C.E. Sims: Hydrogen Embrittlement, Internal Stress and Defects in Steel. *Transactions of the AIME*, Vol. 145 (1941), S. 225–259
- [176] N.J. Petch, P. Stables: Delayed Fracture of Metals under Static Load. *Nature*, Vol. 169 (1952), Nr. 4307, S. 842–843
- [177] D. Kuron: Einfluß des Wasserstoffs auf Titan , Zirconium , Niob und Tantal. In: *Wasserstoff und Korrosion*, D. Kuron (Ed.), Bonn, Verlag Irene Kuron, 2000, S. 212–256
- [178] E. Wendler-Kalsch: Grundlagen und Mechanismen der Wasserstoff-induzierten Korrosion metallischer Werkstoffe. In: *Wasserstoff und Korrosion*, D. Kuron (Ed.), Bonn, Verlag Irene Kuron, 2000, S. 7–53
- [179] U. Zwicker: Wasserstoffversprödung von Titan und Titanlegierungen. *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*, Vol. 5 (1974), Nr. 5, S. 233–241
- [180] R.A. Oriani: A Mechanistic Theory of Hydrogen Embrittlement of Steels. *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, Vol. 76 (1972), Nr. 8, S. 848–857
- [181] H.G. Nelson: Hydrogen Embrittlement. In: *Treatise on Materials Science and Technology: Embrittlement of Engineering Alloys, Volume 25*, C.L. Briant, S.K. Banerji (Ed.), Academic Press Inc, 1983, S. 275–359
- [182] C.D. Beachem: A new model for hydrogen-assisted cracking (hydrogen “embrittlement”). *Metallurgical Transactions B*, Vol. 3 (1972), Nr. 2, S. 441–455

- [183] D.P. Abraham, C.J. Altstetter: The effect of hydrogen on the yield and flow stress of an austenitic stainless steel. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 26 (1995), Nr. 11, S. 2849–2858
- [184] B. Gołebowski, W.A. Swiatnicki, M. Gaspérini: Microstructural changes induced near crack tip during corrosion fatigue tests in austenitic-ferritic steel. *Journal of microscopy*, Vol. 237 (2010), Nr. 3, S. 352–8
- [185] H. Luo, C.F. Dong, Z.Y. Liu, M.T.J. Maha, X.G. Li: Characterization of hydrogen charging of 2205 duplex stainless steel and its correlation with hydrogen-induced cracking. *Materials and Corrosion*, Vol. 64 (2013), Nr. 1, S. 26–33
- [186] A.M. Elhoud, N.C. Renton, W.F. Deans: Hydrogen embrittlement of super duplex stainless steel in acid solution. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35 (2010), Nr. 12, S. 6455–6464
- [187] T. Zakroczyński, a. Glowacka, W. Swiatnicki: Effect of hydrogen concentration on the embrittlement of a duplex stainless steel. *Corrosion Science*, Vol. 47 (2005), Nr. 6, S. 1403–1414
- [188] W. Zheng, D. Hardie: Effect of Structural Orientation on the Susceptibility of Commercial Duplex Stainless Steels to Hydrogen Embrittlement. *Corrosion*, Vol. 47 (1991), Nr. 10, S. 792–799
- [189] T. Magnin, A. Chambreuil, B. Bayle: The corrosion-enhanced plasticity model for stress corrosion cracking in ductile fcc alloys. *Acta Materialia*, Vol. 44 (1996), Nr. 4, S. 1457–1470
- [190] J. Michalska, M. Sozańska, M. Hetmańczyk: Application of quantitative fractography in the assessment of hydrogen damage of duplex stainless steel. *Materials Characterization*, Vol. 60 (2009), Nr. 10, S. 1100–1106
- [191] J.-H. Huang, C.J. Altstetter: Cracking of duplex stainless steel due to dissolved hydrogen. *Metallurgical and Materials Transactions A*, Vol. 26 (1995), Nr. 5, S. 1079–1085
- [192] A. Barnoush, M. Zamanzade, H. Vehoff: Direct observation of hydrogen-enhanced plasticity in super duplex stainless steel by means of in situ electrochemical methods. *Scripta Materialia*, Vol. 62 (2010), Nr. 5, S. 242–245
- [193] J.W. Hsu, S.Y. Tsai, H.C. Shih: Hydrogen Embrittlement of SAF 2205 Duplex Stainless Steel. *Corrosion*, Vol. 58 (2002), Nr. 10, S. 858–862
- [194] W. Świątnicki: The Role of Hydrogen induced Microstructural Changes in the Embrittlement of Austenitic-Ferritic Steel. In: *Proceedings of the 2008 International Hydrogen Conference on Effects of Hydrogen on Materials*, B.P. Somerday, P. Sofronis, R. Jones (Ed.), ASM International, 2008, S. 155–162
- [195] T. Boellinghaus, T. Kannengiesser, C. Jochum, I. Stiebe-Springer: Effect of Filler Material Selection on Stress-Strain Distribution and Hydrogen Cracking in Welded Supermartensitic Stainless Steel Pipes. In: *Corrosion - Conference and Expo*, Denver, Colorado, NACE International, 2002, S. 20

- [196] L. Mishnaevsky: Numerical Experiments in the Mesomechanics of Materials. Habilitationsschrift, Technische Universität Darmstadt, 2005, 150 Seiten
- [197] L.L. Mishnaevsky, S. Schmauder: Continuum Mesomechanical Finite Element Modeling in Materials Development: A State-of-the-Art Review. *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 54 (2001), Nr. 1, S. 49
- [198] D. Gross, T. Seelig: Bruchmechanik. Berlin, Heidelberg, Springer Verlag, 2007, 329 Seiten, ISBN: 978-3-540-37113-7
- [199] T. Boellinghaus, H. Hoffmeister: Numerical Model for Hydrogen-Assisted Cracking. *Corrosion Science*, Vol. 56 (2000), Nr. 6, S. 611–622
- [200] V. Olden, C. Thaulow, R. Johnsen, E. Ostby, T. Berstad: Application of hydrogen influenced cohesive laws in the prediction of hydrogen induced stress cracking in 25%Cr duplex stainless steel. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 75 (2008), Nr. 8, S. 2333–2351
- [201] N.R. Raykar, S.K. Maiti, R.K.S. Raman: Modelling of mode-I stable crack growth under hydrogen assisted stress corrosion cracking. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 78 (2011), Nr. 18, S. 3153–3165
- [202] I. Scheider, M. Pfuff, W. Dietzel: Simulation of hydrogen assisted stress corrosion cracking using the cohesive model. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 75 (2008), Nr. 15, S. 4283–4291
- [203] X. Sun, K.S. Choi, W.N. Liu, M. a. Khaleel: Predicting failure modes and ductility of dual phase steels using plastic strain localization. *International Journal of Plasticity*, Vol. 25 (2009), Nr. 10, S. 1888–1909
- [204] D.L. McDowell, F.P.E. Dunne: Microstructure-sensitive computational modeling of fatigue crack formation. *International Journal of Fatigue*, Vol. 32 (2010), Nr. 9, S. 1521–1542
- [205] M. Ohata, A. Ui, F. Minami: Simulation of Ductile Damage in Two-Phase Structural Steel with Meso-Scale Model. *Materials Science Forum*, Vol. 539-543 (2007), S. 2168–2173
- [206] T. Pardoen, F. Scheyvaerts, A. Simar, C. Tekoğlu, P.R. Onck: Multiscale modeling of ductile failure in metallic alloys. *Comptes Rendus Physique*, Vol. 11 (2010), Nr. 3-4, S. 326–345
- [207] U. Weber: Modellierung von Verformung und Schädigung in Werkstoffgefügen mit unterschiedlich großen Teilchen und unter Wasserstoffeinfluss. Dissertation, Universität Stuttgart, 2006, 166 Seiten
- [208] H. Krull, H. Yuan: Suggestions to the cohesive traction–separation law from atomistic simulations. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 78 (2011), Nr. 3, S. 525–533
- [209] W. Dietzel, M. Pfuff, N. Winzer: Testing and mesoscale modelling of hydrogen assisted cracking of magnesium. *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 77 (2010), Nr. 2, S. 257–263

- [210] U. Weber, P. Deimel, D. Saraev, E. Sattler, S. Schmauder, E. Soppa: Influence of hydrogen on the deformation behaviour of a ferritic fine-grained low alloy steel. *Computational Materials Science*, Vol. 32 (2005), Nr. 3-4, S. 577–587
- [211] S.T. Choi, K.-S. Kim: Nanoscale planar field projections of atomic decohesion and slip in crystalline solids. Part I. A crack-tip cohesive zone. *Philosophical Magazine*, Vol. 87 (2007), Nr. 12, S. 1889–1919
- [212] J.J.J. Rimoli, M. Ortiz: A three-dimensional multiscale model of intergranular hydrogen-assisted cracking. *Philosophical Magazine*, Vol. 90 (2010), Nr. 21, S. 2939–2963
- [213] DIN EN 10088-1: Nichtrostende Stähle - Teil 1: Verzeichnis der nichtrostenden Stähle. 2005, 49 Seiten
- [214] Deutsche Edelstahlwerke: Nichtrostender austenitischer-ferritischer Stahl 1.4462. Witten, 2008, 4 Seiten
- [215] W. Ramberg, W.R. Osgood: Description of Stress-Strain Curves by three Parameters. Washington, Technical Note No. 902, NASA Scientific and Technical Information Facility, 1943, 32 Seiten
- [216] K.J.R. Rasmussen: Full-range stress–strain curves for stainless steel alloys. *Journal of Constructional Steel Research*, Vol. 59 (2003), Nr. 1, S. 47–61
- [217] Y. Ling: Uniaxial True Stress-Strain after Necking. *AMP Journal of Technology*, Vol. 5 (2004), Nr. 6, S. 37–48
- [218] N. Tsuchida, T. Kawahata, E. Ishimaru, A. Takahashi, H. Suzuki, T. Shobu: Static Tensile Deformation Behavior of a Lean Duplex Stainless Steel Studied by In Situ Neutron Diffraction and Synchrotron Radiation White X-rays. *ISIJ International*, Vol. 53 (2013), Nr. 7, S. 1260–1267
- [219] V. Romanova, R. Balokhonov, S. Schmauder: Three-dimensional analysis of mesoscale deformation phenomena in welded low-carbon steel. *Materials Science and Engineering: A*, Vol. 528 (2011), Nr. 15, S. 5271–5277
- [220] H. Andersson: A finite-element representation of stable crack-growth. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 21 (1973), Nr. 5, S. 337–356
- [221] P. Zimmer: Zur Bewertung der Kaltrissicherheit von Schweißverbindungen aus hochfesten Feinkornbaustählen. Dissertation, Helmut-Schmidt-Universität Hamburg, 2007, 169 Seiten
- [222] T. Bollinghaus, H. Hoffmeister, L. Reuter: Material properties of as delivered and quenched modified martensitic stainless steels dependent on hydrogen concentration. In: *Proceedings of the 1st International Conference Supermartensitic Stainless Steels*, Brüssel, Belgian Welding Institute, 1999, S. 264–271
- [223] A.A. El-yazgi, D. Hardie: The embrittlement of a duplex stainless steel by hydrogen in a variety of environments. *Corrosion Science*, Vol. 38 (1996), Nr. 5, S. 735–744

- [224] C. San Marchi, T. Michler, K. a. Nibur, B.P. Somerday: On the physical differences between tensile testing of type 304 and 316 austenitic stainless steels with internal hydrogen and in external hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 35 (2010), Nr. 18, S. 9736–9745
- [225] T. Matsuo, J. Yamabe, S. Matsuoka, Y. Murakami: Influence of Hydrogen and Prestrain on Tensile Properties of Type 316L Austenitic Stainless Steel. In: *Proceedings of the 2008 International Hydrogen, Effects of Hydrogen on Materials*, B. Somerday, P. Sofronis, R. Jones (Ed.), ASM International, 2009, S. 105–112
- [226] C.S. Marchia, B.P. Somerday, X. Tangb, G.H. Schiroky: Effects of alloy composition and strain hardening on tensile fracture of hydrogen-precharged type 316 stainless steels. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 33 (2008), Nr. 2, S. 889–904
- [227] C. Skipper, G. Leisk, A. Saigal, D. Matson, C.S. Marchi: Effect of Internal Hydrogen on Fatigue Strength of Type 316 Stainless Steel. In: *Proceedings of the 2008 International Hydrogen Conference, Effects of Hydrogen on Materials*, B. Somerday, P. Sofronis, R. Jones (Ed.), ASM International, 2009, S. 139–146
- [228] C.M. Younes, a. M. Steele, J. a. Nicholson, C.J. Barnett: Influence of hydrogen content on the tensile properties and fracture of austenitic stainless steel welds. *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 38 (2013), Nr. 11, S. 4864–4876
- [229] N.N.: DIN EN ISO 3690: Schweißen und verwandte Prozesse - Bestimmung des Wasserstoffgehaltes im Lichtbogenschweißgut. Beuth Verlag GmbH, 2012
- [230] L. Spieß, G. Teichert, R. Schwarzer, H. Behnken, G. Christoph: Moderne Röntgenbeugung. Wiesbaden, Vieweg + Teubner, 2009, 564 Seiten, ISBN: 978-3-8349-9434-9
- [231] E. Macherauch, P. Müller: Das  $\sin^2\psi$ -Verfahren der röntgenographischen Spannungsmessung. *Zeitschrift für angewandte Physik*, Vol. 13 (1961), Nr. 7, S. 305–312
- [232] J.A. Donovan: Accelerated evolution of hydrogen from metals during plastic deformation. *Metallurgical Transactions A*, Vol. 7 (1976), Nr. 11, S. 1677–1683
- [233] H. Schumann: Einfluß der Stapelfehlerenergie auf den kristallographischen Umgitterungsmechanismus der  $\gamma/\alpha$ -Umwandlung in hochlegierten Stählen. *Kristall und Technik*, Vol. 9 (1974), Nr. 10, S. 1141–1152
- [234] A.J.W. Menezes, H. Abreu, S. Kundu, H.K.D.H. Bhadeshia, P.M. Kelly: Crystallography of Widmanstätten austenite in duplex stainless steel weld metal. *Science and Technology of Welding and Joining*, Vol. 14 (2009), Nr. 1, S. 4–10
- [235] Y. Yang, B. Yan, J. Li, J. Wang: The effect of large heat input on the microstructure and corrosion behaviour of simulated heat affected zone in 2205 duplex stainless steel. *Corrosion Science*, Vol. 53 (2011), Nr. 11, S. 3756–3763

- [236] J. Nowacki: Ferritic-austenitic steel and its weldability in large size constructions. *Journal of Achievements in Materials and Manufacturing Engineering*, Vol. 32 (2009), Nr. 2, S. 115–141
- [237] J.-O. Nilsson, P. Jonsson, A. Wilson: Formation of secondary austenite in super duplex stainless steel weld metal and its dependence on chemical composition. In: *Fourth International Conference Duplex Stainless Steels, Paper 39*, T.G. Gooch (Ed.), Glasgow, Scotland, Woodhead Publishing Ltd, 1994, S. 12
- [238] R. Badji, B. Bacroix, M. Bouabdallah: Texture, microstructure and anisotropic properties in annealed 2205 duplex stainless steel welds. *Materials Characterization*, Vol. 62 (2011), Nr. 9, S. 833–843
- [239] L. Mciridi, K. Inal, J.L. Lebrun: Analysis by X-ray diffraction of the mechanical behaviour of austenitic and ferritic phases of a duplex stainless steel. In: *Advances in X-ray Analysis Vol. 42*, 1998, S. 397–406
- [240] G.E. Dieter: Elements of the Theory of Plasticity. In: *Mechanical Metallurgy*, New York, McGraw Hill Higher Education, 1988, S. 69–102

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1:	Beispiele für den Einsatz von Duplexstählen a) in Tankern für den Transport von chemischen Substanzen und b) auf Offshore-Plattformen für die Ölförderung .....	1
Abbildung 2.1:	Quasi-Binärer Schnitt des Eisen-Chrom-Nickel-Phasendiagramms bei 70 % Eisen, Bereich der Duplexstähle (grau) und Überblick über mögliche Phasenausscheidungen, nach [2, 4, 28] .....	7
Abbildung 2.2:	Gefügestruktur eines gewalzten Duplexstahls [4].....	8
Abbildung 2.3:	Verbindungsstück aus geschmiedetem Duplexstahl und Ort der wasserstoffunterstützten Rissbildung [10] .....	13
Abbildung 2.4:	Rissfortschritt entlang der Querschnittsänderung in der Nähe der Schweißnaht und Querschleiff mit Riss vorwiegend im $\delta$ -Ferrit (dunkel) [11] .....	14
Abbildung 2.5:	Modelle zur Beschreibung der Spannungen und Dehnungen in zweiphasigen Gefügen nach Fischmeister und Karlsson [68] (links) sowie Cho und Gurland [67] (rechts).....	18
Abbildung 2.6:	Dreidimensionale Darstellung eines Quadranten der Einheitszelle für die Finite-Elemente-Berechnung und Verlauf der Spannungen in der austenitischen ( $\circ$ ) und ferritischen ( $\bullet$ ) Phase während eines thermischen Zyklus 20-900-20 °C [65] .....	19
Abbildung 2.7:	FEM-Modell eines Realgefüges, Ferrit + Martensit (30 %) [68] .....	20
Abbildung 2.8:	Berechnete Phasenspannungen im Austenit (links) und $\delta$ -Ferrit (rechts) [36] .....	21
Abbildung 2.9:	Übersicht der wichtigsten wasserstoffunterstützten Schäden in Metallen [12].....	23
Abbildung 2.10:	Einflussfaktoren auf die wasserstoffunterstützte Werkstoffschädigung .	24
Abbildung 2.11:	Okta- und Tetraeder Zwischengitterplätze im kfz (oben) und im krz (unten) Gitter [94] .....	27
Abbildung 2.12:	Schematische Darstellung des ersten Fickschen Gesetzes [104].....	28
Abbildung 2.13:	Schematische Darstellung von Wasserstofffallen in Metallen [12] .....	31
Abbildung 2.14:	Schematische Darstellung einer Wasserstofffalle nach Oriani [93] und McLellan [118], aus [12] .....	31
Abbildung 2.15:	Schematische Darstellung verschiedener Wasserstofffallen [116] .....	32
Abbildung 2.16:	Schematische Darstellung des Abstreifens von Wasserstoff an eingelagerten Teilchen [121] .....	35
Abbildung 2.17:	Schematische Darstellung der Rissentstehung nach der Dekohäsionstheorie (links [178]) und Darstellung der herabgesetzten Dekohäsionenergie (U) und -spannung ( $\sigma$ ) über die kritische Öffnung der Grenzfläche (r), mit $a_0$ – Gitterparameter (rechts [180]) .....	41
Abbildung 2.18:	Schematische Darstellung des Rissfortschrittes nach dem HELP Mechanismus [25] .....	42
Abbildung 2.19:	Schematische Darstellung des AIDE Mechanismus (links) und AIDE im Zusammenwirken mit HELP und HEDE (rechts) [79] .....	43

Abbildung 2.20:	Mikroskopische Aufnahmen wasserstoffunterstützter Risse in Duplexstählen, Rissbildung in der ferritischen Phase und Arretierung des Risses in der austenitischen Phase [15, 186].....	44
Abbildung 2.21:	Schematische Darstellung des Rissfortschrittes im Duplexstahl unter Wasserstoffeinfluss. Position A zeigt einen Riss durch den Austenit ( $\gamma$ ), einen alternativen Risspfad entlang der Phasengrenze ist am Punkt B zu sehen. Das mikromechanische Modell nutzt die Dehnungsverteilung in einem Winkel von $\theta = 45^\circ$ [19].....	45
Abbildung 2.22:	Schematische Darstellung der verschiedenen Stufen des „Corrosion-Enhanced Plasticity“ Modells [189].....	45
Abbildung 2.23:	Rasterelektronenmikroskopische Aufnahmen von Risserscheinungen in Duplexstählen [19, 60, 110, 161].....	46
Abbildung 2.24:	Wechsel der Bruchtopographie in Abhängigkeit der lokalen Wasserstoffkonzentration und der lokalen Beanspruchung in einem supermartensitischen Stahl (links) [25] und niedriglegierten hochfesten Stählen (rechts) [182] .....	48
Abbildung 2.25:	Prinzipdarstellung der drei Rissöffnungsarten [198].....	50
Abbildung 2.26:	Schematische Darstellung der drei Risswachstumsphasen: a) Kinetik des Rissfortschritts als Funktion der Spannungsintensität [12, 25, 181]; b) Beziehung zwischen Risslänge und Zeit zur Beschreibung der Werkstoffeigenschaften unter den Konditionen der HAC (TTF-Time to Failure: Zeit bis zum Versagen) [12, 25].....	51
Abbildung 2.27:	Darstellung verschiedener Modelle zur Simulation einer Werkstoffschädigung.....	53
Abbildung 3.1:	Orientierung der ferritischen (dunkel) und austenitischen (hell) Phase im Duplexstahl, geätzt mit Beraha II.....	60
Abbildung 3.2:	Schliff des Duplexgefüge quer zur Walzrichtung (links), ausgewählter Bereich von $100 \mu\text{m} \times 100 \mu\text{m}$ (Mitte), Mesomodell des Duplexgefüge (rechts), $\delta$ -Ferrit = dunkel, Austenit = hell .....	62
Abbildung 3.3:	Querschliff vom Gefüge einer Schweißnaht des Duplexstahls, Modell des realen Schweißnahtgefüges und vereinfachte Modelle des Schweißnahtgefüges.....	63
Abbildung 3.4:	Darstellung des dreidimensionalen (oben) und zweidimensionalen (unten) Modells der Zugprobe mit sehr feiner Vernetzung im Messbereich für die Übertragung der makroskopischen Beanspruchung auf das Mesomodell des Duplexgefüges.....	64
Abbildung 3.5:	Schematische Darstellung der Diffusionsrichtungen längs (roter Pfeil) und quer (blauer Pfeil) zur Orientierung des Gefüges im Grundwerkstoff.....	67
Abbildung 3.6:	Wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven des Duplexstahls sowie der austenitischen und ferritischen Phase für Fall 1.....	70
Abbildung 3.7:	Wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven des Duplexstahls sowie der austenitischen und ferritischen Phase für Fall 2.....	70
Abbildung 3.8:	Schematische Darstellung der Randbedingungen für den Zugversuch am Modell des Realgefüges im Grundwerkstoff in Anlehnung an [207] .....	71



Abbildung 3.9:	Schematische Darstellung der Übertragung der makroskopischen Verschiebungen aus der Zugprobe auf das Modell des Realgefüges ...	72
Abbildung 3.10:	Schematische Darstellung der „node-release“ Technik und Berechnung des aktuellen Rissspitzenwinkels für die numerische Abbildung der Werkstoffschädigung.....	74
Abbildung 3.11:	Verschiedene wasserstoffabhängige Bruchkriterien für Duplexstähle, austenitische CrNi-Stähle, supermartensitische Stähle und hochfeste Feinkornbaustähle (Literatur siehe Text).....	75
Abbildung 3.12:	Schematische Darstellung der Lage der Risspfade im Modell des Realgefüges .....	77
Abbildung 3.13:	Versuchsaufbau am Versuchsstand EDDI im BESSY, kippbare Zugprüfmaschine mit eingespannter Zugprobe .....	80
Abbildung 3.14:	Energiedispersives Spektrum des Duplexstahls X2CrNiMoN 22-5-3 unter einem $2\Theta$ -Winkel von $10,3^\circ$ (eigene Untersuchungen) .....	80
Abbildung 4.1:	Simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration im einfachen Modell für $HD_0 = 2 \text{ Nm}/100 \text{ g Fe}$ (links) und $HD_0 = 30 \text{ Nm}/100 \text{ g Fe}$ (rechts) nach 12 h Beladung .....	83
Abbildung 4.2:	Normierter Verlauf der Sättigung im einfachen Modell .....	84
Abbildung 4.3:	Simulierte Verteilung der Wasserstoffkonzentration in Abhängigkeit von der Gefügeorientierung (Diffusion längs der Orientierung – oberer Bildreihe, Diffusion quer zur Orientierung – untere Bildreihe) ....	85
Abbildung 4.4:	Vergleich der Wasserstoffdiffusion in Abhängigkeit der Orientierung des Gefüges im Grundwerkstoff (GW) des Duplexstahls .....	87
Abbildung 4.5:	Vergleich der phasenspezifischen Wasserstoffdiffusion in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls für die Beladung längs und quer zur Gefügeorientierung .....	88
Abbildung 4.6:	Vergleich der Wasserstoffdiffusion unter Berücksichtigung von Trapping an der Phasengrenze (gestrichelte Linien) zur Diffusion ohne Trapping im Grundwerkstoff (GW).....	89
Abbildung 4.7:	Vergleich der Wasserstoffdiffusion im Grundwerkstoff (GW) mit Trapping (schwarze Linie gestrichelt) oder Enhancing (schwarze Linie) zur unbeeinflussten Diffusion (blaue Linie).....	90
Abbildung 4.8:	Vergleich der Wasserstoffdiffusion im Grundwerkstoff nach zwölfstündiger Beladung längs der Gefügeorientierung a) ohne Trapping und Enhancing, b) Trapping an der Phasengrenze und c) Enhancing an der Phasengrenze .....	90
Abbildung 4.9:	Simulierte Wasserstoffverteilung im Grundwerkstoff nach 100 s, einer Stunde und 12 Stunden Effusion.....	91
Abbildung 4.10:	Vergleich der experimentell [166] und numerisch ermittelten Verteilung von Deuterium bzw. Wasserstoff im Duplexgefüge .....	92
Abbildung 4.11:	Vergleich der phasenspezifischen Wasserstoffdiffusion in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls für die Effusion mit und ohne Trapping an der Phasengrenze .....	93
Abbildung 4.12:	Mikroschliff des Grundwerkstoffs (links) und des Schweißguts (rechts).....	94

Abbildung 4.13:	Simulierte Wasserstoffverteilung im Schweißnahtgefüge nach a) 100 s, b) einer Stunde und c) 12 Stunden Effusion bei anfänglich homogener Wasserstoffverteilung.....	95
Abbildung 4.14:	Schematische Darstellung des verwundenen Diffusionspfades im $\delta$ -Ferrit (links) [114] und vom Austenit umschlossenen ferritische Gefügebereiche (rechts) [112].....	95
Abbildung 4.15:	Simulierte Wasserstoffverteilung in einer Duplex-Schweißnaht nach 100 s, einer Stunde und 12 Stunden Effusion für einen verbundenen $\delta$ -Ferrit und ein komplett vom Austenit umschlossenen $\delta$ -Ferrit .....	96
Abbildung 4.16:	Verlauf Wasserstoffeffusion im Grundwerkstoff (GW) und Schweißgut (SG) bei anfänglich homogener Wasserstoffverteilung und allseitiger Effusion .....	97
Abbildung 4.17:	Vergleich der simulierten Fließkurven mit den experimentell ermittelten Fließkurven unter Nutzung verschiedener Randbedingungen für das 3D und 2D Modell der Zugprobe .....	100
Abbildung 4.18:	Vergleich der simulierten Fließkurven mit den experimentell ermittelten Fließkurven unter Nutzung verschiedener Randbedingungen für das Modell des Realgefüges.....	100
Abbildung 4.19:	Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für den Fall 1 (F1).....	102
Abbildung 4.20:	Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten technischen Spannungs-Dehnungs-Kurven für den Fall 2 (F2).....	102
Abbildung 4.21:	Vergleich der wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen sowie des berechneten makroskopischen Verhaltens bei Reihen- und Parallelbelastung für beide Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens .....	105
Abbildung 4.22:	Vergleich der berechneten makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven beider Fälle des phasenspezifischen mechanischen Verhaltens für Reihen- und Parallelbelastung des zweiphasigen Gefüges.....	106
Abbildung 4.23:	Detail der wahren Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen sowie des berechneten makroskopischen Verhaltens bei Reihenbelastung für Fall 2 (Detail aus Abbildung 4.21d) .....	107
Abbildung 4.24:	Numerisch ermittelte wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen und resultierende makroskopische Fließkurve des Duplexstahls für Fall 1 (F1), Modell des Realgefüges .....	109
Abbildung 4.25:	Numerisch ermittelte wahre Spannungs-Dehnungs-Kurven der Phasen und resultierende makroskopische Fließkurve des Duplexstahls für Fall 2 (F2), Modell des Realgefüges .....	109
Abbildung 4.26:	Simulierte Verteilung der wahren Spannung (von Mises) in den Phasen des Duplexgefüges resultierend aus der makroskopischen Beanspruchung der Zugprobe für Fall 1 und Fall 2 .....	113
Abbildung 4.27:	Simulierte Verteilung der wahren Dehnung (von Mises) in den Phasen des Duplexgefüges resultierend aus der makroskopischen Beanspruchung der Zugprobe für Fall 1 und Fall 2; In Abbildung e) ist	

	ein Pfad zur Auswertung der phasenspezifischen Spannungen und Dehnungen gezeigt .....	115
Abbildung 4.28:	Vergleich der wahren Dehnung (von Mises) in der austenitischen (grau) und ferritischen (weiß) Phase des Duplexstahls für Fall 1 (F1) und Fall 2 (F2) entlang eines Pfades im Modell des Realgefüges bei 20 % globaler Dehnung .....	117
Abbildung 4.29:	Vergleich der wahren Spannung (von Mises) in der austenitischen (grau) und ferritischen (weiß) Phase des Duplexstahls für Fall 1 (F1) und Fall 2 (F2) entlang eines Pfades im Modell des Realgefüges bei 20 % globaler Dehnung .....	117
Abbildung 4.30:	Wahre Vergleichsdehnung und wahre Vergleichsspannung nach von Mises in der austenitischen (a bis d) und ferritischen (e bis h) Phase des Duplexstahls bei 20 % globaler Dehnung des Modells für Fall 1 (linke Bildreihe) und Fall 2 (rechte Bildreihe).....	118
Abbildung 4.31:	Wahre Phasenspannungen in Abhängigkeit der wahren makroskopischen Spannung des Modells des Realgefüges für Fall 1	120
Abbildung 4.32:	Experimentell ermittelte Phasenspannung in Abhängigkeit der aufgeprägten makroskopischen Spannung aus der Arbeit von Dakhlouai et al. [58].....	121
Abbildung 4.33:	Wahre Phasenspannungen in Abhängigkeit der wahren makroskopischen Spannung des Modells des Realgefüges für Fall 2	122
Abbildung 4.34:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung der simulierten Werkstoffschädigung für Fall 1 (linke Bildreihe) und Fall 2 (rechte Bildreihe).....	125
Abbildung 4.35:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei duktiler Werkstofftrennung entlang des Risspfades C2.....	127
Abbildung 4.36:	Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme der Bruchfläche einer duktil versagten Zugprobe des Duplexstahls X2CrNiMoN22-5-3 (Wst.-Nr.: 1.4462).....	128
Abbildung 4.37:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei spröder Werkstofftrennung in der ferritischen und duktiler Werkstofftrennung in der austenitischen Phase entlang des Risspfades C2.....	130
Abbildung 4.38:	Vergleich der äquivalenten plastischen Dehnung entlang der rechten Rissflanke im Risspfad C2 für sprödes und duktiles Versagen, austenitische Bereiche sind grau markiert.....	130
Abbildung 4.39:	Rasterelektronenmikroskopische (REM) Aufnahme der Bruchfläche einer wasserstoffbeladenen Zugprobe des Duplexstahls X2CrNiMoN22-5-3 (Wst.-Nr.: 1.4462) mit spröden und duktilen Anteilen auf der Bruchfläche .....	131
Abbildung 4.40:	Vergleich der Risslängen in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit der globalen Dehnung des Realgefügemodells im Risspfad C2 für a) duktile Werkstofftrennung in beiden Phasen und b) spröde Werkstofftrennung im $\delta$ -Ferrit und duktile Werkstofftrennung im Austenit .....	132

Abbildung 4.41:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei duktiler Werkstofftrennung.....	134
Abbildung 4.42:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge bei spröder Werkstofftrennung .....	135
Abbildung 4.43:	Vergleich der Risslängen in den Phasen des Duplexstahls in Abhängigkeit der globalen Dehnung des Modells des Realgefüges für a) duktile Werkstofftrennung in beiden Phasen und b) spröde Werkstofftrennung im $\delta$ -Ferrit und duktile Werkstofftrennung im Austenit .....	137
Abbildung 4.44:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge, nach vollständiger Werkstofftrennung bzw. Simulationsende für die Bruchkriterien 2 % (a, b), 5 % (c, d) und 7 % (e, f).....	138
Abbildung 4.45:	Erreichte globale Dehnung in der austenitische und ferritischen Phase bei Rissinitiierung (Start) und vollständiger Trennung (Ende) in Abhängigkeit des angenommenen Duktilitätsverlustes in der ferritischen Phase.....	139
Abbildung 4.46:	Wahre Vergleichsspannung und -dehnung (von Mises) im Duplexgefüge, bei Wirkung hoher Wasserstoffkonzentrationen.....	140
Abbildung 4.47:	Vergleich der Eigenspannungen ( $\sigma_{11}$ - $\sigma_{33}$ ) und ( $\sigma_{22}$ - $\sigma_{33}$ ) in der ferritischen und austenitischen Phase des Duplexstahls vor und nach der Lagerung in Flüssigstickstoff.....	143
Abbildung 4.48:	Technische Spannungs-Dehnungs-Kurven beladener und wasserstofffreier Zugproben.....	144
Abbildung 4.49:	Makroskopische Rissbildung an der Oberfläche der wasserstoffbeladenen Zugprobe .....	145
Abbildung 4.50:	REM-Aufnahmen der Bruchfläche einer wasserstoffbeladener Zugprobe .....	146
Abbildung 4.51:	REM-Aufnahmen der Bruchfläche einer wasserstoffbeladener Zugprobe aus den in-situ Beugungsexperiment im Zugversuch .....	148
Abbildung 4.52:	Vergleich der makroskopischen Spannungs-Dehnungs-Kurven aus den in-situ Beugungsexperimenten mit den Kurven der ex-situ Zugversuche .....	149
Abbildung 4.53:	Phasenspannungen ( $\sigma_{11}$ - $\sigma_{33}$ ) der wasserstofffreien Zugprobe im Vergleich zu den globalen Makrospannungen ( $\sigma_M$ ) aus den ex-situ Zugversuchen .....	151
Abbildung 4.54:	Phasenspannungen ( $\sigma_{11}$ - $\sigma_{33}$ ) der beladenen Zugprobe im Vergleich zu dem Phasenspannungen der wasserstofffreien Zugprobe und zu den globalen Makrospannungen ( $\sigma_M$ ) aus den ex-situ Zugversuchen.	152
Abbildung A 1:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für austenitische korrosionsbeständige Stähle der Serie AISI 316.....	200
Abbildung A 2:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für austenitische korrosionsbeständige Stähle der Serie AISI 304.....	202

Abbildung A 3:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für Duplexstähle .....	204
Abbildung A 4:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für supermartensitische Stähle (SMSS) im a) Lieferzustand und b) im abgeschreckten Zustand [25,222].....	205
Abbildung A 5:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für den hochfesten Feinkornbaustahl S1100QL [221] .....	206
Abbildung A 6:	Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für den hochfesten Feinkornbaustahl S690QL [221] .....	206
Abbildung A 7:	Vergleich der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration für alle Werkstoffe .....	207



## Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1:	Typische chem. Zusammensetzungen (in Gew.-%) der vier Arten von Duplexstählen [43] .....	8
Tabelle 2.2:	Chemische Zusammensetzung in Gew.-% und mech. Eigenschaften korrosionsbeständiger Stähle, nach [4] .....	10
Tabelle 3.1:	Chemische Zusammensetzung des Duplexstahls 1.4462 in Gew.-% und mechanische Eigenschaften .....	59
Tabelle 3.2:	Übersicht zu den numerischen Modellen sowie deren Vernetzung und Verwendung .....	63
Tabelle 3.3:	Verwendete effektive Diffusionskoeffizienten für die numerische Simulation der Wasserstoffverteilung im Duplexstahl 1.4462 .....	65
Tabelle 3.4:	Verwendete mechanische Kennwerte des Duplexstahls und der Phasen des Duplexstahls für die beiden simulierten Fälle .....	68
Tabelle 3.5:	Parameter der kathodischen Wasserstoffbeladung .....	79
Tabelle 3.6:	Mess- und Auswerteparameter der Messungen mittels energiedispersiver Synchrotronstrahlung der Zugprobe .....	81
Tabelle 3.7:	Mess- und Auswerteparameter der Messungen mittels Röntgenstrahlung an den Plättchen aus Duplexstahl .....	82
Tabelle 4.1:	Ermittelte mechanische Kennwerte und Wasserstoffkonzentrationen der beladenen und unbeladenen Zugproben .....	144
Tabelle A 1:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [224] .....	198
Tabelle A 2:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [225] .....	198
Tabelle A 3:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [226] .....	199
Tabelle A 4:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [227] .....	200
Tabelle A 5:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [145] .....	201
Tabelle A 6:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [224] .....	201
Tabelle A 7:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [228] .....	201
Tabelle A 8:	Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls 2507 [19] .....	203

Tabelle A 9: Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls Uranus 45N (Wst.-Nr.: 1.4462) [187].....	203
Tabelle A 10: Werte der wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls 1.4462 [188] .....	203
Tabelle A 11: Werte der richtungsabhängigen wahren Bruchdehnung $\varepsilon_w$ des Duplexstahls 1.4462 [223] .....	204



## Symbolverzeichnis

Abkürzung	Einheit	Bezeichnung
A	[%]	Bruchdehnung
A	[mm <sup>2</sup> ]	Aktuelle Querschnittsfläche der Zugprobe
a <sub>0</sub>	Å	Gitterkonstante
A <sub>0</sub>	[mm <sup>2</sup> ]	Ausgangsquerschnittsfläche der Zugprobe
A <sub>5</sub>	[%]	Bruchdehnung bei kurzem Proportionalstab
A <sub>b</sub>	[mm <sup>2</sup> ]	Querschnittsfläche beim Bruch der Zugprobe
A <sub>gt</sub>	[%]	Gleichmaßdehnung
AIDE	[-]	Adsorption-Induced Dislocation Emmission
Axi	[-]	Axialsymmetrie
BAM	[-]	Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
BESSY	[-]	Berliner Elektronenspeicherring-Gesellschaft für Synchrotronstrahlung
C	[wt.-ppm]	Konzentration
c	[m·s <sup>-1</sup> ]	Lichtgeschwindigkeit
c <sub>p</sub>	[J·(kg·K) <sup>-1</sup> ]	spezifische Wärmekapazität
CZM	[-]	Cohesive Zone Model (Kohäsivzonenmodell)
D	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Diffusionskoeffizient
D <sub>0</sub>	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Gitterdiffusionskoeffizient im reinen Eisen
DC	[-]	ductile cracking (duktiler Riss)
D <sub>E</sub>	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Diffusionskoeffizient bei beschleunigter Diffusion
d <sub>hkl</sub>	[mm]	Netzebenenabstand
D <sub>T</sub>	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Diffusionskoeffizient bei Trapping
D <sub>α</sub>	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Diffusionskoeffizient der ferritischen Phase
D <sub>γ</sub>	[mm <sup>2</sup> ·s <sup>-2</sup> ]	Diffusionskoeffizient der austenitischen Phase
E	[MPa]	Elastizitätsmodul
E <sub>A</sub>	[kJ·mol <sup>-1</sup> ]	Aktivierungsenergie
EDDI	[-]	energy dispersive diffraction, Versuchsstation am BESSY
EDZ	[-]	ebener Dehnungszustand

EET	[-]	Element-Elimination-Technique
$E_{\text{hkl}}$	[keV]	netzebenspezifische Energie
ESZ	[-]	ebener Spannungszustand
FBM	[-]	Fibre Bundle Model
FE	[-]	Finite-Elemente
FEA	[-]	Finite-Elemente-Analyse
FEM	[-]	Finite-Elemente-Methode
$\Delta G$	[J]	Reaktionsenthalpie
gEDZ	[-]	generalisierter ebener Dehnungszustand
GTN	[-]	Gurson-Tvergaard-Needleman (Modell)
GW	[-]	Grundwerkstoff
h	[eV·s]	Plancksches Wirkungsquantum
$H^+$	[-]	ionisierter Wasserstoff
$H_{\text{abs}}$	[-]	absorbierter Wasserstoff
HAC	[-]	hydrogen-assisted cracking (wasserstoffunterstützte Rissbildung)
$H_{\text{ads}}$	[-]	adsorbierter Wasserstoff
HD	[ml·(100g Fe) <sup>-1</sup> ]	Wasserstoffkonzentration (auch in wt.-ppm, Umrechnung: 1 ml·(100g Fe) <sup>-1</sup> = 0,89 wt.ppm)
HD <sub>0</sub>	[ml·(100g Fe) <sup>-1</sup> ]	Wasserstoffausgangskonzentration
HEDE	[-]	Hydrogen Enhanced Decohesion
HELP	[-]	Hydrogen Enhanced Localized Plasticity
IC	[-]	intercrystalline cracking (interkristalliner Riss)
J	[mol·(m <sup>2</sup> ·s) <sup>-1</sup> ]	Teilchenstromdichte (Fluss)
$j_{\text{HD}}$	[mA·cm <sup>-2</sup> ]	Stromdichte bei der Wasserstoffbeladung
$k_{\text{B}}$	[J·K <sup>-1</sup> ]	Boltzmann-Konstante
kfz	[-]	kubisch-flächenzentriert
$K_{\text{th}}$	[MPa·m <sup>1/2</sup> ]	kritische Spannungsintensität
krz	[-]	kubisch-raumzentriert
$l_0$	[mm]	Ausgangsmesslänge der Zugprobe
MVC	[-]	microvoid coalescence (Riss durch Zusammenwachsen von Mikroporen)

n	[-]	Beugungsordnung
$p_H$	[kPa]	Partialdruck des Wasserstoffs
PRE	[-]	pitting resistance equivalent
QC	[-]	quasi-cleavage cracking (Quasispaltbruch)
R	[J·(mol·K) <sup>-1</sup> ]	universelle Gaskonstante (R=8,314472(15) J·(mol·K) <sup>-1</sup> )
$R_m$	[MPa]	Zugfestigkeit
$R_{p0,2}$	[MPa]	Streckgrenze / Dehngrenze
$s_1, \frac{1}{2}s_2$	[mm <sup>2</sup> ·N <sup>-1</sup> ]	diffractionelastische Konstanten
SG	[-]	Schweißgut
SSRT	[-]	slow strain rate test
T	[K]	absolute Temperatur
t	[s]	Zeit
TEM	[-]	Transmissionselektronenmikroskop
TGHE	[-]	Trägergas-Heißextraktion
$t_{HD}$	[h]	Zeit der Wasserstoffbeladung
ToF-SIMS	[-]	Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry (Flugzeit-Sekundärionen-Massenspektrometrie)
TTF	[-]	Time-to-Failure (Zeit bis zum Versagen)
U	[J·mol <sup>-1</sup> ]	Kohäsionsenergie
$v_{Riss}$	[mm+s <sup>-1</sup> ]	Rissgeschwindigkeit
x, y, z	[-]	kartesische Koordinaten

### Griechische Symbole

$\alpha$	[-]	ferritische Phase des Duplexstahls
$\gamma$	[-]	austenitische Phase des Duplexstahls
$\varepsilon$	[-]	Dehnung
$\varepsilon_t$	[-]	technische Dehnung
$\varepsilon_w$	[-]	wahre Bruchdehnung
$\varepsilon_{\Phi\Psi}$	[-]	Gitterdehnung in Richtung $\Phi, \Psi$
$\vartheta$	[°C]	Temperatur
$\Theta_{nkl}$	[°]	Beugungswinkel
$\kappa$	[W·(m·K) <sup>-1</sup> ]	Wärmeleitfähigkeit

## Symbolverzeichnis

---

$\lambda$	[mm]	Wellenlänge
$\rho$	[kg·m <sup>-3</sup> ]	Dichte
$\sigma$	[MPa]	Spannung
$\sigma_0, \sigma_{0,2}$	[MPa]	Streckgrenze / Dehngrenze
$\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{33}$	[MPa]	Spannungskomponenten der drei Raumrichtungen
$\sigma^P$	[MPa]	Komponente des Spannungstensors im Probenkoordinatensystem P
$\sigma_w$	[MPa]	wahre Spannung
$\Phi, \Psi$	[°]	Orientierungswinkel der Messrichtung bezüglich des Probenkoordinatensystems
$\Omega, \Gamma$	[MPa]	Ermittelte Dehngrenzen der Phasen im Röntgenbeugungsexperiment

## Anhang

Nachfolgend sind die wahren Bruchdehnungen in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration für austenitische korrosionsbeständige Stähle, Duplexstähle, supermartensitische Stähle und hochfeste Feinkornbaustähle sowie die Gleichungen der entsprechenden Kurven dargestellt. Für die austenitischen korrosionsbeständigen Stähle und die Duplexstähle wurde die Literatur zur wasserstoffunterstützten Werkstoffschädigung ausgewertet [19, 145, 187, 188, 223–228]. Die Auswertung zur wahren Bruchdehnungen erfolgte unter Berücksichtigung verschiedener Legierungskonzepte sowie einer Kaltverfestigung, um entsprechende Einflüsse unterschiedlicher Legierungselemente als auch einer plastischen Verformung Rechnung zu tragen. Für den supermartensitischen Stahl (SMSS) und für die hochfesten Feinkornbaustähle wurde auf vorhandene Daten zurückgegriffen [25, 221, 222]. Die jeweiligen Kurven der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration liegen am unteren Ende des Streubandes der wahren Bruchdehnung und repräsentieren somit den „worst case“. Im Fall des SMSS repräsentiert die Kurve eher die obere Grenze der wahren Bruchdehnung. Für die Berechnung der wahren Bruchdehnung mit den angegebenen *Gleichungen (5A) bis (11A)* ist die Wasserstoffkonzentration HD in [wt.-ppm] zu nutzen. In der schweißtechnischen Norm DIN EN ISO 3690 [229] ist die Angabe der Wasserstoffkonzentration in  $[\text{ml} \cdot (100\text{gFe})^{-1}]$  üblich. Der Faktor für die Umrechnung zwischen den Einheiten ergibt sich aus der spezifischen Dichte von Wasserstoff unter Normalbedingungen von  $\rho_{\text{H}} = 89,88 \cdot 10^{-6} \text{ g} \cdot \text{ml}^{-1}$ . Dementsprechend sind  $1 \text{ ml} \cdot (100\text{gFe})^{-1} = 0,8988 \text{ wt.-ppm}$ , mit  $1 \text{ wt.-ppm} = 1 \mu\text{g} \cdot \text{g}^{-1}$ .

Die wahren Bruchdehnungen der austenitischen korrosionsbeständigen Stähle und der Duplexstähle wurden unter Nutzung der angegebenen Brucheinschnürungen aus den Literaturwerten über folgende Gleichung berechnet. Zunächst wurde die Gleichung zur Berechnung der Brucheinschnürung *Gleichung (1A)* nach der Querschnittsfläche beim Bruch umgestellt, *Gleichung (2A)*:

$$Z = \frac{\Delta A}{A_0} = \frac{A_0 - A_b}{A_0}, \quad (1A)$$

$$A_b = A_0 - Z \cdot A_0, \quad (2A)$$

mit Z: Brucheinschnürung in %,  $A_0$ : Ausgangsquerschnitt und  $A_b$ : Querschnitt beim Bruch.

Durch Einsetzen von *Gleichung (2A)* in die Formel zur Berechnung der wahren Bruchdehnung, *Gleichung (3A)* [240], ergibt sich die verwendete Gleichung zur Berechnung der wahren Bruchdehnung  $\varepsilon_w$  aus der Brucheinschnürung, *Gleichung (4A)*:

$$\varepsilon_w = \ln(\varepsilon_t + 1) = \ln\left(\frac{A_0}{A_b}\right), \quad (3A)$$

$$\varepsilon_w = \ln\left(\frac{1}{1 - \frac{Z}{100}}\right), \quad (4A)$$

mit  $\varepsilon_t$ : technische Dehnung.

Falls in den Tabellen nicht anders angegeben liegen die Stähle im lösungsgeglühten Zustand vor, wie es z.B. in *Kapitel 2.1.1* beschrieben ist.

Tabelle A 1: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [224]

Werkstoff	Wst.-Nr.	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$	
316	1.4401	<b>ASS_16</b> Druckwasserstoffbelastung: 34,5 MPa, T= 300 °C, 26 Tage  Zugprüfung: Dehnrate: 1E-5	59	65	1,0498	
316L	1.4404		0		84	1,8326
					78	1,5141
			59		57	0,8440
					43	0,5621
					54	0,7765
316LN	1.4429		0	90	2,3026	
316L	1.4435		0		83	1,7720
					77	1,4697
			59		75	1,3863
					70	1,2040
316Ti	1.4571		0		79	1,5605
					75	1,3863
			59		68	1,1394
	62			0,9676		
SUS316L	-		0		83	1,7720
				85	1,8971	
		59		75	1,3863	
				76	1,4271	

Tabelle A 2: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [225]

Werkstoff	Bemerkung	Kaltverfestigung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
SUS316L	<b>ASS_12</b> Druckwasserstoffbelastung: 10 MPa, T= 250 °C, 192 Stunden  Zugprüfung: Dehnrate: 1mm/min.  Kaltverfestigung über Reduktion der Probendicke (Walzen) → Angaben in % von der Blechdicke $t_0$ im Ausgangszustand	0		88	2,1203
				20	79
		15		84,5	1,8643
				77,5	1,4917
		30		80	1,6094
				72	1,2730
		45		77,5	1,4917
				66	1,0788
		60		76	1,4271
				64	1,0217

Tabelle A 3: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [226]

Werkstoff	Bemerkung	Kaltverfestigung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
316	<b>ASS_4</b> Druckwasserstoffbelastung: 138 MPa, T= 300 °C, 10 Tage  Zugprüfung: Dehnrate: 1,5E-3  Kaltverfestigter Lieferzu- stand (strain hardened)	nein	0	80	1,6094
				85	1,8971
				85	1,8971
			136	69	1,1712
				72	1,2730
				70	1,2040
		ja	0	78	1,5141
				78	1,5141
				77	1,4697
			136	75	1,3863
				66	1,0788
				68	1,1394
316L	Kaltverfestigter Lieferzu- stand (strain hardened)  Unverfestigte Stähle wur- den lösungsgeglüht und abgeschreckt	nein	0	54	0,7765
				81	1,6607
			136	83	1,7720
				62	0,9676
		ja	0	72	1,2730
				78	1,5141
				77	1,4697
				82	1,7148
			136	76	1,4271
				59	0,8916
				70	1,2040
				47	0,6349
			62	0,9676	

Tabelle A 4: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [227]

Werkstoff	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
316	<b>ASS_3</b> Druckwasserstoffbelastung: 138 MPa, T= 300 °C, 30 Tage	0	81	1,6607
		108	66	1,0788
316L	Zugprüfung: Dehnrate: 0,02 mm/s  Kaltverfestigter Lieferzustand (strain hardened)	0	80	1,6094
		108	62	0,9676

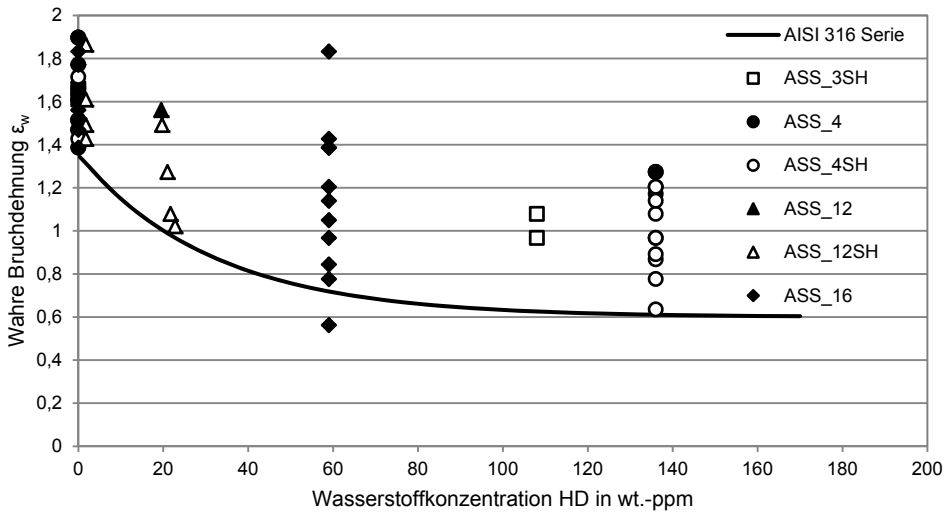


Abbildung A 1: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für austenitische korrosionsbeständige Stähle der Serie AISI 316

Funktion der Kurve für die Serie AISI 316, Gleichung (5A):

$$\epsilon_w = 0,75 \cdot e^{-\frac{HD}{32}} + 0,6 \quad (5A)$$

Mit HD in [wt.-ppm].



Tabelle A 5: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [145]

Werkstoff	Bemerkung	Kaltverfestigung t/t <sub>0</sub> in %	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
304L	<b>ASS_19</b> Druckwasserstoffbelastung: 69 MPa, T= 100 °C, 30 Tage  Zugprüfung: Dehnrate: -	nein	0	77	1,4697
			57	32	0,3857
		high energy rate forged	0	79	1,5606
			57	76	1,4271

Tabelle A 6: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [224]

Werkstoff	Wst.- Nr.	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
304	1.4301	<b>ASS_16</b> Druckwasserstoffbelastung: 34,5 MPa, T= 300 °C, 26 Tage	0	83	1,7720
				85	1,8971
			59	35	0,4308
				25	0,2877
304L	1.4306	Zugprüfung: Dehnrate: 1E-5	0	84	1,4697
				59	60
			60		0,9163

Tabelle A 7: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD von austenitischen korrosionsbeständigen Stählen [228]

Werkstoff	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
304L	<b>ASS_15</b> Keine Belastung, kaltverfestigt	0	62	0,9676
	Druckwasserstoffbelastung: 24 MPa, T = 300 °C, 22 Tage, kaltverfestigt	57	50	0,6931
	Druckwasserstoffbelastung: 79 MPa, T = 300 °C, 33 Tage, kaltverfestigt	110	39	0,4943
	Druckwasserstoffbelastung: 138 MPa, T = 300 °C, 25 Tage, kaltverfestigt	160	32	0,3857

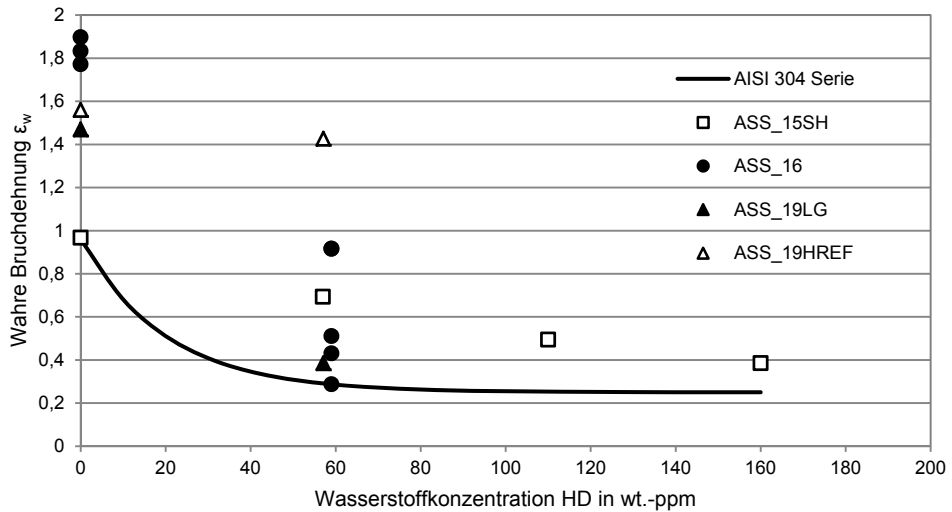


Abbildung A 2: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für austenitische korrosionsbeständige Stähle der Serie AISI 304

Funktion der Kurve für die Serie AISI 304, Gleichung (6A):

$$\epsilon_w = 0,71 \cdot e^{-\frac{HD}{20}} + 0,25 \quad (6A)$$

Mit HD in [wt.-ppm].

Tabelle A 8: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls 2507 [19]

Werkstoff	Bemerkung	Kaltverfestigung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
2507	<b>DSS_3</b> Druckwasserstoffbelastung: 138 MPa, T= 300 °C, 7 Tage  Zugprüfung: Dehnrate: 1,2E-3	nein	0	85	1,8971
			125	46	0,6162
		strain hardened	0	80	1,6094
			125	25	0,2877

Tabelle A 9: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls Uranus 45N (Wst.-Nr.: 1.4462) [187]

Werkstoff	Wst.-Nr.	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
Uranus 45N	1.4462	<b>DSS_1</b> Elektrochemisch beladen mit unterschiedlichen Elektrolyten, $i_c = 20 \text{ mA/cm}^2$ , 14 Tage  Zugprüfung: Dehnrate: 2,6E-7 Weitere Beladung wäh- rend der Zugprüfung	0	93	2,6593
			18	28	0,3285
			26	26	0,2744
			63	18	0,1985
		204	12	0,1278	

Tabelle A 10: Werte der wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration HD des Duplexstahls 1.4462 [188]

Werkstoff	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
2205	<b>DSS_13</b> Druckwasserstoffbelastung: 17 MPa, T= 350 °C, 2 Tage Zugprüfung: Dehnrate: 1E-5 in 0,2 MPa H-Atmosphäre	0	84	1,8326
		15	35	0,4308
	Druckwasserstoffbelastung: 17 MPa, T= 350 °C, 2 Tage Zugprüfung: Dehnrate: 2E-2 in 0,2 MPa H-Atmosphäre	0	85	1,8971
		15	60	0,9163

Tabelle A 11: Werte der richtungsabhängigen wahren Bruchdehnung  $\epsilon_w$  des Duplexstahls 1.4462 [223]

Werkstoff	Bemerkung	HD in wt.-ppm	Z in %	$\epsilon_w$
2205	DSS_2 Zugprüfung: Dehnrate: 1,2E-5 bis 6,4E-3 längs der Gefügeorientierung	0	78	1,5141
	Zugprüfung: Dehnrate: 1,2E-5 bis 6,4E-3 quer der Gefügeorientierung		71	1,2379

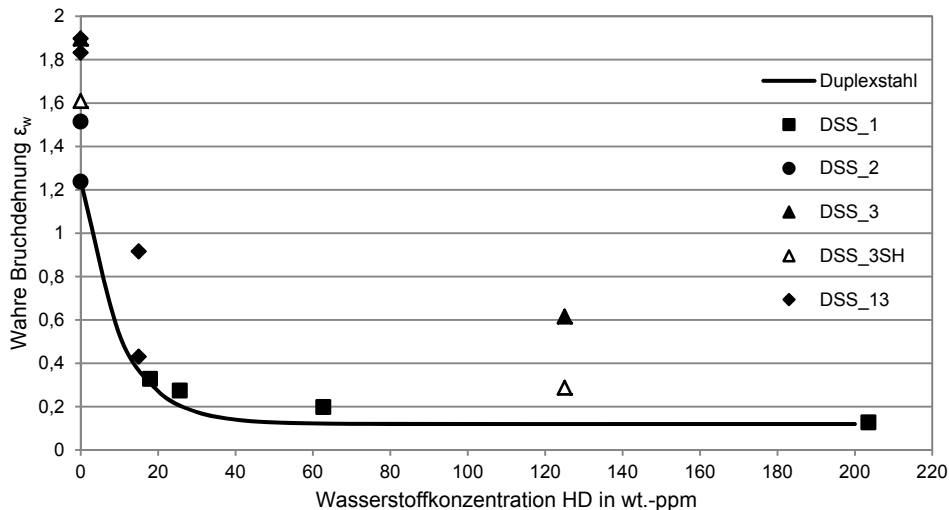


Abbildung A 3: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für Duplexstähle

Funktion der Kurve für die Duplexstähle, Gleichung (7A):

$$\epsilon_w = 1,12 \cdot e^{-\frac{HD}{10}} + 0,12 \quad (7A)$$

Mit HD in [wt.-ppm].

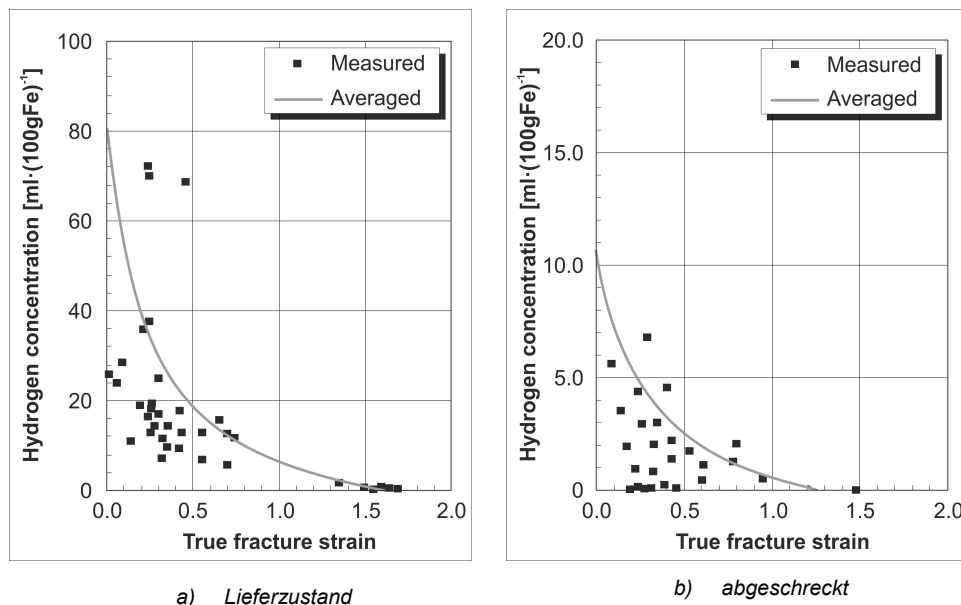


Abbildung A 4: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für supermartensitische Stähle (SMSS) im a) Lieferzustand und b) im abgeschreckten Zustand [25, 222]

Funktion der Kurve für SMSS im Lieferzustand, Gleichung (8A) [25, 222]:

$$\varepsilon_w = 1,62844 \cdot \left(0,93673^{(1,1126 \cdot \text{HD})}\right) \quad (8A)$$

Funktion der Kurve für SMSS im abgeschreckten Zustand, Gleichung (9A) [25, 222]:

$$\varepsilon_w = e^{(0,2377 - 0,27125 \cdot \text{HD} - 0,01219 \cdot (1,1126 \cdot \text{HD})^2)} \quad (9A)$$

Mit HD in [wt.-ppm].

Im Fall der supermartensitischen Stähle wurde die wahre Bruchdehnung des Werkstoffs im abgeschreckten Zustand gewählt, da dieser am ehesten dem Herstellungsprozess der Duplexstähle entspricht (siehe Kapitel 2.1.1). Im Vergleich der Werte des Lieferzustandes und der im abgeschreckten Zustand ist ersichtlich, dass die Werte der wahren Bruchdehnung für den abgeschreckten Zustand einen „worst case“ repräsentieren. Für die Ermittlung der Funktion der entsprechenden Kurven wurde ein graphischer Fit durchgeführt und die Gleichung entsprechend nach  $\varepsilon_w$  umgestellt.

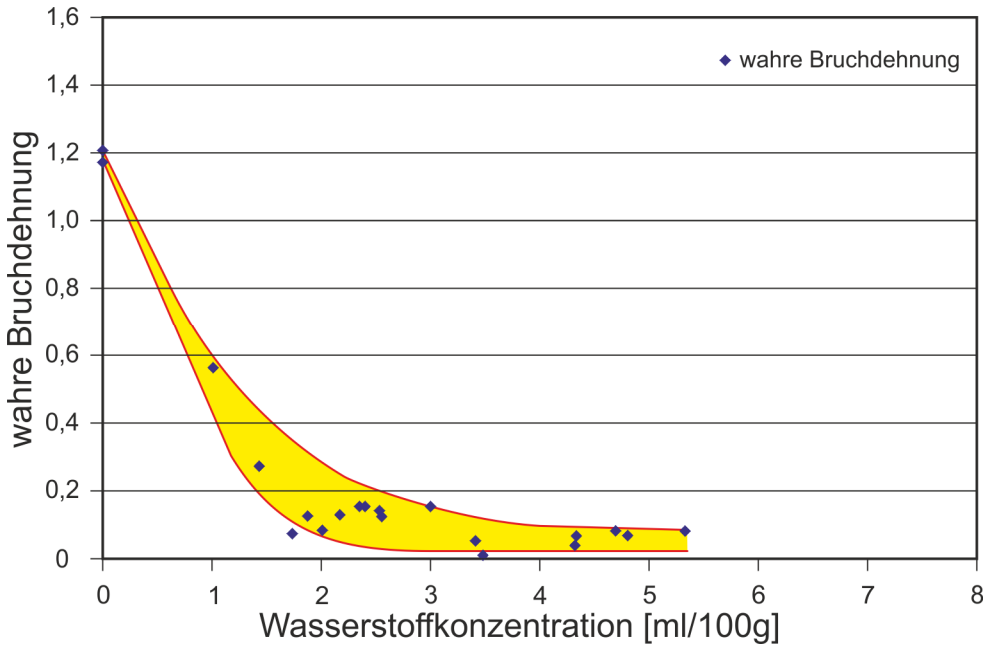


Abbildung A 5: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für den hochfesten Feinkornbaustahl S1100QL [221]

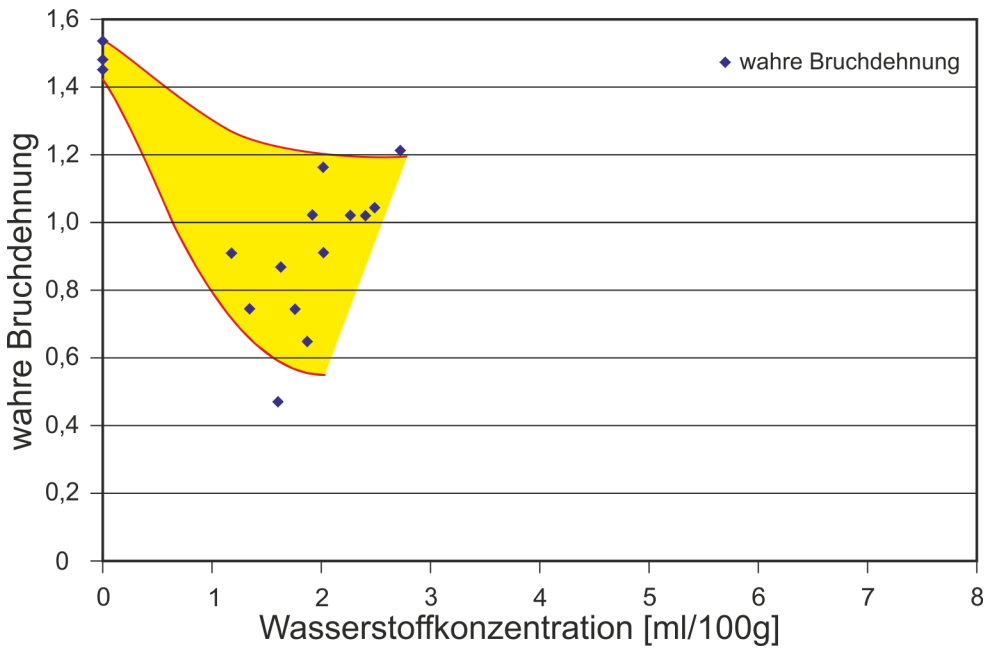


Abbildung A 6: Werte und Kurve der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit der Wasserstoffkonzentration für den hochfesten Feinkornbaustahl S690QL [221]

Funktion der unteren Kurve für S1100QL, Gleichung (10A), nach [221]:

$$\varepsilon_w = 0,8062 \cdot e^{\frac{-1,1126 \cdot HD}{0,7967}} + 0,339 \cdot e^{\frac{-1,1126 \cdot HD}{0,8324}} + 0,0329 \quad (10A)$$

Funktion der unteren Kurve für S690QL, Gleichung (11A), nach [221]:

$$\varepsilon_w = 1,1354 \cdot e^{\frac{-1,1126 \cdot HD}{1,1598}} + 0,3243 \quad (11A)$$

Mit HD in [wt.-ppm].

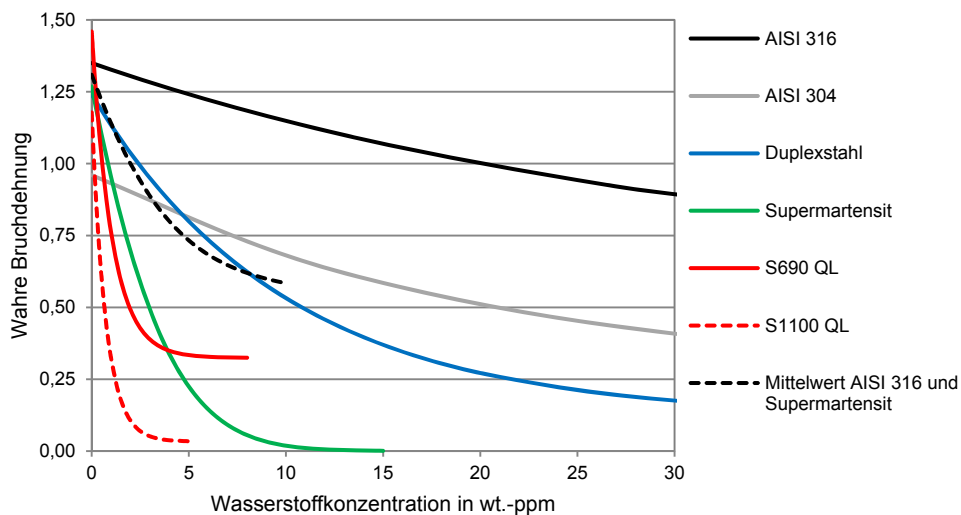


Abbildung A 7: Vergleich der wahren Bruchdehnung in Abhängigkeit von der Wasserstoffkonzentration für alle Werkstoffe





## Lebenslauf

### Persönliche Daten:

Name, Vorname	<b>Mente, Tobias</b>
Geburtsdatum, -ort	26. Januar 1983 in Halberstadt
Familienstand	ledig
Staatsangehörigkeit	deutsch

### Ausbildung und berufliche Tätigkeiten

09/1989 – 07/1993	Louis Fürnberg Grundschule Wegeleben
08/1993 – 06/2002	Käthe-Kollwitz-Gymnasium Halberstadt, Abitur
08/2002 – 05/2003	Zivildienst, Untere Naturschutzbehörde Stadt Quedlinburg
08/2003 – 09/2003	Grundpraktikum bei der Firma. hatewe GmbH Halberstadt
10/2003 – 10/2009	Studium des Maschinenbaus mit der Studienrichtung Produktionstechnik (Vertiefung Fügetechnik) an der Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg, Abschluss als Dipl.-Ing., Diplomprüfung am 16. Oktober 2009,  Diplomarbeit: Numerische Simulation der Kaltrissbildung in Schweißnähten hochfester Feinkornbaustähle
11/2009 – z. Zt.	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung in Berlin, Fachbereich 9.3 Schweißtechnische Fertigungsverfahren und Fachbereich 9.4 Integrität von Schweißverbindungen