

Elastic and plastic properties of fcc Fe-Mn based alloys

Von der Fakultät für Georessourcen und Materialtechnik
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften

genehmigte Dissertation

vorgelegt von **Dipl.-Ing.**

Stephanie Christine Marie-France Reeh

aus Düsseldorf

Berichter: Univ.-Prof. Jochen M. Schneider, Ph.D.
Professor Dr.-Ing. Dierk Raabe

Tag der mündlichen Prüfung: 25.04.2013

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Hochschulbibliothek online verfügbar

Materials Chemistry Dissertation

No.: 22 (2013)

Stephanie Reeh

**Elastic and plastic properties
of fcc Fe-Mn based alloys**

Shaker Verlag
Aachen 2013

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: D 82 (Diss. RWTH Aachen University, 2013)

Copyright Shaker Verlag 2013

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-2311-4

ISSN 1861-0595

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

“It is the glory of God to conceal a thing:
but the honour of kings is to search out a matter.”

Proverbs 25:2

I Table of contents

I	Table of contents	i
II	Abstract	iv
III	Preface	xi
IV	List of contributing publications	xii
V	List of figures	xiv
VI	List of tables	xvii
VII	Symbols and abbreviations.....	xxiii
VIII	Acknowledgements	xxiv
1	Introduction	1
1.1	Motivation	3
1.2	Goals	3
1.3	Structure of the thesis	5
2	Theoretical methods	7
2.1	Density functional theory.....	7
2.2	<i>Ab initio</i> calculation methods	8
3	Experimental methods	12
3.1	Thin film growth	12
3.1.1	Combinatorial DC magnetron sputtering.....	12
3.1.2	Experimental setup	14
3.2	Thin film characterization	17

3.2.1	XRD and EBSD analysis of the structure and crystallographic texture	18
3.2.2	EDX and WDX analysis of the chemical composition.....	21
3.2.3	Nanoindentation measurements of the local mechanical properties....	22
4	Results and discussion	28
4.1	Fe-Mn-C alloys	28
4.1.1	Chemical composition.....	28
4.1.2	Structure and crystallographic texture.....	32
4.1.3	Elastic properties	37
4.1.4	Electronic structure	40
4.2	Fe-Mn-C-Al alloys.....	41
4.2.1	Chemical composition.....	41
4.2.2	Elastic and plastic properties.....	43
4.2.3	Pile-up behavior	46
4.3	Fe-Mn-Al alloys	48
4.3.1	<i>Ab initio</i> calculations of the elastic properties	48
4.3.2	Experimentally determined elastic properties	50
4.3.3	Structure, crystallographic texture and phase formation	53
4.4	Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) alloys	58
4.4.1	<i>Ab initio</i> calculations of the elastic properties	58
4.4.2	Experimentally determined elastic properties	66
5	Conclusions	73

6	Future work	79
IX	References.....	xxvi

II Abstract

High Mn steels exhibit an excellent combination of high strength and extraordinary ductility, which make these steels interesting as lightweight steels with advanced crash resistance and high formability in the automotive industry. This outstanding property combination is enabled by several deformation mechanisms, namely dislocation glide, transformation induced plasticity (TRIP) and twinning induced plasticity (TWIP). The deformation mechanisms are affected by the stacking fault energy (SFE), which is dependent on temperature and chemical composition.

In the first part of this thesis, the influence of the chemical composition on the elastic properties of face-centered-cubic (fcc) Fe-Mn alloys with additions of C, Al, Cr, Co, Ni and Cu was investigated by combinatorial thin film approach and *ab initio* calculations.

The influence of C and Mn content on the Young's modulus of Fe-Mn-C alloys has been studied experimentally and theoretically. Combinatorial thin film and bulk samples were characterized regarding their structure, texture and Young's modulus. The experimental lattice parameters change marginally within 3.597 to 3.614 Å with addition of C and are consistent with *ab initio* calculations. The Young's modulus data are in the range of 185 ± 12 to 251 ± 59 GPa for the bulk samples and the thin film, respectively. C has no significant effect on the Young's modulus of these alloys within the composition range studied here. The comparison of thin film and bulk samples results reveals similar elastic properties for equivalent compositions.

The influence of the Al concentration in Fe-Mn alloys on their elastic properties has been investigated on combinatorial Fe-Mn-Al thin films deposited with different

substrate bias potentials to analyze the effect on the phase formation, microstructure, texture and elastic properties. With higher substrate bias potentials (-75 V and -100 V) fine polycrystalline structure with γ -Fe (fcc), α -Fe body-centered-cubic (bcc) and β -Mn phases was obtained while with lower substrate bias potentials (≤ -50 V) the γ -Fe (fcc) phase was prominent and a preferred growth direction in $\langle 111 \rangle$ is observed. The calculated phase equilibria by Calphad method are consistent with the experimentally determined phases. With addition of Al into the Fe-Mn matrix, the lattice expands from 3.614 to 3.672 Å as the Al concentration increases from 0 to 20 at.-%. The observed lattice expansion is consistent for calculations and experiments. Neither the Al content nor the substrate bias potential influence the Young's modulus values significantly.

Ab initio calculations were performed to predict the lattice parameter, bulk-to-shear modulus ratio (B/G ratio) and Young's modulus of fcc Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni and Cu) and combinatorial thin films were synthesized and analyzed regarding chemical composition, structure and elastic properties to validate the predictions. Both the calculations and experiments indicate that with addition of element X in Fe-Mn alloys the lattice parameter and Young's modulus values were marginally affected and generally very good agreement is obtained between the predictions and the experimentally obtained data. Additions with Cr and Co seem to exhibit no substantial effect on the B/G ratio, while with additions of Cu and Ni the B/G ratio is increased up to 19.2% and 11.6%, respectively. The trends in B/G may be understood by considering the changes in shear modulus G induced by the variation in valence electron concentration (VEC). As the VEC is increased, more pronounced metallic bonds are formed, giving rise to smaller shear modulus values.

In the second part, the effect of the chemical composition on the plastic properties was studied by nanoindentation technique for selected fcc Fe-Mn-C-Al alloys with varying Al concentration. Bulk samples with varying Al content have been electro-chemically polished and analyzed locally in their chemical composition, local mechanical properties and topography. The indentation stress-strain curves were determined based on the load-displacement data of the indentations. The curves exhibit a large scattering in stress and strain with a maximum deviation in stress by 0.680 GPa and in strain by 0.004, which is maybe due to the different indentation positions on the samples with varying chemical composition and topography. With increasing Al concentration a decreased yielding was observed which might be explained by weaker dynamic Hall-Petch strengthening. The sample with higher Al contents exhibits a pronounced pile-up in comparison with the sample with lower Al concentrations.

The obtained experimental and calculated results of the phase formation, lattice parameter and the Young's modulus values are in good agreement and emphasize the combined experimental and theoretical approach is a valuable research strategy for future design of multi-component high Mn steels. The use of the nanoindentation technique to study the plastic properties of high Mn steels is a powerful method for describing the deformation behavior locally especially in combination with investigations of the local microstructure and texture.

Hochmanganhaltige Stähle weisen eine exzellente Kombination von hoher Festigkeit und außergewöhnlicher Duktilität auf, die diese Stähle als Leichtbaustähle mit fortgeschrittener Crashresistenz und hoher Umformbarkeit für die Automobilindustrie interessant machen. Diese herausragende Eigenschaftskombination wird durch verschiedene Verformungsmechanismen wie Versetzungsgleiten, verformungsinduzierte Austenit-Martensitumwandlung (TRIP) und mechanisch induzierte Zwillingbildung (TWIP) ermöglicht. Diese Verformungsmechanismen werden insbesondere durch die Stapelfehlerenergie (SFE) beeinflusst, die von Temperatur und chemischer Zusammensetzung abhängig ist.

Im ersten Teil dieser Doktorarbeit wurde der Einfluss der chemischen Zusammensetzung auf die elastischen Eigenschaften von kubisch-flächenzentrierten (kfz) Fe-Mn-Legierungen mit Zugabe von C, Al, Cr, Co, Ni und Cu mittels kombinatorischer Dünnschichtsynthese und *ab initio*-Berechnungen untersucht.

Der Einfluss des C- und Mn-Gehalts auf den E-Modul von Fe-Mn-C-Legierungen wurde experimentell und theoretisch ermittelt. Sowohl kombinatorische Dünnschichten als auch Großproben wurden hinsichtlich ihrer Struktur, Textur und E-Modul charakterisiert. Der experimentelle Gitterparameter änderte sich mit Zugabe von C nur gering zwischen 3.597 und 3.614 Å. Der E-Modul variierte für die Großproben sowie für die Dünnschichten in einem Bereich von 185 ± 12 bis 251 ± 59 GPa. C hat keinen signifikanten Einfluss auf den E-Modul dieser Legierungen in dem hier untersuchten chemischen Zusammensetzungsbereich. Der Vergleich der Untersuchungsergebnisse von Dünnschichten und Großproben ergab ähnliche elastische Eigenschaften für äquivalente Zusammensetzungen.

Der Einfluss des Al-Gehalts auf die elastischen Eigenschaften in Fe-Mn-Legierungen wurde anhand kombinatorischer Fe-Mn-Al-Dünnschichten mit unterschiedlichen

Substrat-Bias-Potentialen untersucht, um den Effekt auf die Phasenbildung, Gefüge, Textur und elastischen Eigenschaften zu analysieren. Mit höheren Substrat-Bias-Potentialen (-75 V und -100 V) wurde eine feine polykristalline Struktur mit γ -Fe (kfz), α -Fe kubisch-raumzentriert (krz) und β -Mn Phasen erzielt, während bei geringeren Substrat-Bias-Potentialen (≤ -50 V) die γ -Fe (kfz) Phase mit einer Vorzugsorientierung in Wachstumsrichtung $\langle 111 \rangle$ prominent war. Die Gleichgewichtsphasen wurden mittels der Calphad-Methode berechnet und waren konsistent mit den experimentell bestimmten Phasen. Mit Zugabe von 0 bis 20 at.-% Al in der Fe-Mn-Matrix vergrößert sich das Gitter von 3.614 auf 3.672 Å. Die Gittervergrößerung ist konsistent für Berechnungen und Experimente. Weder der Al-Gehalt noch das Substrat-Bias-Potential haben einen signifikanten Einfluss auf den E-Modul.

Ab initio-Berechnungen wurden durchgeführt, um den Gitterparameter, das Kompressionsmodul-Schermodul-Verhältnis (B/G-Verhältnis) und den E-Modul von kfz Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) zu prognostizieren. Kombinatorische Dünnschichten wurden synthetisiert und anhand der chemischen Zusammensetzung, Struktur und elastischen Eigenschaften analysiert, um die Prognosen zu verifizieren. Die Berechnungen sowie die Experimente zeigen, dass mit Zugabe des Elements X in Fe-Mn-Legierungen der Gitterparameter und der E-Modul nur gering beeinflusst werden und dass generell eine ausgezeichnete Übereinstimmung zwischen den Prognosen und den experimentell ermittelten Daten besteht. Zugaben von Cr und Co scheinen keinen wesentlichen Effekt auf das B/G-Verhältnis zu zeigen, während mit Zugaben von Cu und Ni das B/G-Verhältnis mit bis zu 19.2% für Cu bzw. 11.6% für Ni steigt. Dieser Trend könnte durch die Änderungen des Schermoduls G, welche durch die Variation der Valenzelektronenkonzentration (VEC) induziert wird, verstanden wer-

den. Mit steigender VEC entstehen stärker ausgeprägte metallische Bindungen, die einen geringeren Schermodul hervorrufen.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurde der Einfluss der chemischen Zusammensetzung auf die plastischen Eigenschaften für ausgewählte kfz Fe-Mn-C-Al-Legierungen mit unterschiedlichen Al-Gehalten mittels Nanoindentation untersucht. Großproben mit variierendem Al-Gehalt wurden elektrochemisch poliert und lokal in ihrer chemischen Zusammensetzung, mechanischen Eigenschaften und Topographie analysiert. Basierend auf den Last-Eindringtiefen-Daten der Indentationen wurden Spannungs-Dehnungs-Kurven bestimmt. Die Kurven zeigen eine große Streuung in Spannung und Dehnung mit einer maximalen Abweichung von 0.680 GPa in der Spannung und von 0.004 bezüglich der Dehnung. Diese Abweichungen könnten sich durch die unterschiedlichen Indentationspositionen auf den Proben mit variierenden chemischen Zusammensetzungen und Topographien erklären. Mit steigendem Al-Gehalt wurde ein geringeres Fließen beobachtet, welches sich durch eine schwächere dynamische Hall-Petch-Verfestigung erklären ließe. Die Probe mit höherem Al-Gehalt zeigt ein ausgeprägtes Pile-up-Verhalten im Vergleich zur Probe mit geringerer Al-Konzentration.

Die bezüglich der Phasenbildung, des Gitterparameters und des E-Moduls experimentell ermittelten Ergebnisse auf der einen und die mittels *ab initio*-Methode berechneten Ergebnisse auf der anderen Seite weisen eine ausgezeichnete Übereinstimmung auf. Dies zeigt, dass der in dieser Dissertation verfolgte, kombiniert auf Experimenten und *ab initio*-Berechnungen beruhende Ansatz eine nützliche Strategie für zukünftiges Design von vielkomponentigen hochmanganhaltigen Stählen ist. Darüber hinaus ist die Verwendung der Nanoindentation zur Untersuchung der lokalen plastischen Eigenschaften von hochmanganhaltigen Stählen eine potente

Methode, um das Deformationsverhalten, besonders in Kombination mit Untersuchungen des Gefüges und Struktur, zu beschreiben.

III Preface

The work presented in this thesis is a summary of research performed at Materials Chemistry, RWTH Aachen University, Germany. This work is part of a project funded by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) within the collaborative research centre (SFB) 761 “Steel – *ab initio*; quantum mechanics guided design of new Fe based materials”. The financial support by the DFG is gratefully acknowledged.

AFM, EBSD and WDX measurements were conducted by Central Facility for Electron Microscopy, RWTH Aachen University, Germany. Measurements with EBSD analysis were performed by Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH, Germany. These collaborations are thankfully acknowledged.

IV List of contributing publications

The following publications contributed to the thesis:

Paper I

Elastic properties of fcc Fe-Mn-C studied by nanoindentation and ab initio calculations

S. Reeh, D. Music, T. Gebhardt, M. Kasprzak, T. Jäpel, S. Zaefferer, D. Raabe, S. Richter, A. Schwedt, J. Mayer, B. Wietbrock, G. Hirt, J. M. Schneider

Acta Materialia 60 (2012) 6025-6032

Paper II

Elastic properties of fcc Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) alloys from first-principles calculations

S. Reeh, D. Music, M. Ekholm, I. A. Abrikosov, J. M. Schneider

Physical Review B 87 (2013) 224103

Paper III

Elastic properties of fcc Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) alloys studied by the combinatorial thin film approach and ab initio calculations

S. Reeh, M. Kasprzak, C. D. Klusmann, F. Stalf, D. Music, M. Ekholm, I. A. Abrikosov, J. M. Schneider

Journal of Physics: Condensed Matter 25 (2013) 245401

Paper IV

Structure evolution of combinatorial Fe-Mn-Al thin films under ion bombardment

S. Reeh, M. Kasprzak, B. Hallstedt, D. Music, A. Schwedt, J. Mayer, J. M. Schneider

In manuscript

V List of figures

Fig. 3.1. A schematic drawing of the magnetron sputtering system.....	13
Fig. 3.2. Schematic experimental combinatorial setup with two elemental targets Fe and Z and one compound target $\text{Fe}_{50}\text{Mn}_{50}$	14
Fig. 3.3. Schematic illustration of the 145 points grid on the combinatorial thin film. 17	
Fig. 3.4. Schematic illustration of the X-ray diffraction described by the Bragg's law [54].	19
Fig. 3.5. A schematic illustration of the load-displacement curve following Fischer-Cripps [57].....	23
Fig. 3.6. Schematic illustration of the pile-up and sink-in following Taljat et al. [67]...	25
Fig. 3.7. Load as function of time applied on samples C1 and C2.....	27
Fig. 4.1. C content of the thin film with the measured line scans (black dots), sample size is 51 mm diameter.	30
Fig. 4.2. Compositional spread of the thin film with the measured line scans (black dots) for a) iron and b) manganese content, sample size is 51 mm diameter....	31
Fig. 4.3. Topography of the Fe-Mn-C thin film in the a) as deposited state and b) after polishing.	32
Fig. 4.4. Phase evolution of thin films versus a) C content for Fe/Mn of ~ 2.2 from this work and b) Mn content for 0 at.-% C taken from the data of Gebhardt et al. [16].	33
Fig. 4.5. Lattice parameter as a function of the C content for thin film (rectangles), bulk samples (triangles) and calculations (stars).....	35
Fig. 4.6. Young's modulus as a function of C content for thin film (rectangles) and bulk samples (triangles) and calculations (stars) for a) as deposited thin film and b) polished thin film.....	39
Fig. 4.7. Electron density distribution of a) Fe-36.4 at.-%Mn-3 at.-%C and b) Fe-25 at.-%Mn in the (004) plane.	41

Fig. 4.8. Chosen positions of the line scans along the indents of a) sample C1 and b) sample C2.....	42
Fig. 4.9. Chemical composition in at.-% along the indents of the samples a) C1 and b) C2.	42
Fig. 4.10. Indentation stress-strain curves for the samples a) C1 and b) C2.....	44
Fig. 4.11. Averaged indentation stress-strain curves for the samples C1 and C2....	46
Fig. 4.12. AFM measurements of an indent and two line scans on sample C1.....	47
Fig. 4.13. AFM measurements of an indent and two line scans on sample C2.....	48
Fig. 4.14. Experimental (filled rectangles) and calculated (open circles) lattice parameters vs. Al content and data taken from Gebhardt et al. [18] and Marinelli et al. [69].	51
Fig. 4.15. Young's modulus as a function of Al content for thin films (rectangles) and calculations (circles) for a variation of the substrate bias potential.....	52
Fig. 4.16. The detected crystallographic phases of Fe-Mn-Al thin films in a calculated ternary phase diagram at 450 °C using the thermodynamic description from Umino et al. [84] for different substrate bias potentials: a) -100 V, b) -75 V, c) -50 V, d) -25 V, e) -13 V.	55
Fig. 4.17. Influence of the substrate bias potential onto grain structure, texture and phase formation. All fields have been measured at positions with an approximate composition of about 61 at.-% Fe, 27 at.-% Mn and 12 at.-% Al.	56
Fig. 4.18. Influence of the chemical composition onto the phase formation, grain structure and texture at a constant substrate bias potential of -100 V.....	57
Fig. 4.19. Total energy (dots) and local magnetic moments of Fe (rectangles) and Mn (triangles) versus lattice parameter calculated for Fe-Mn-X with a Fe/Mn ratio of 2.33 and 2 at.-% X, a) X = Cr, b) X= Co, c) X = Ni, d) X = Cu.	58
Fig. 4.20. Bulk modulus (a) and shear modulus (b) for fcc Fe-Mn and Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) with an addition of X up to 8 at.-% for Fe/Mn ratio = 4 and 2.33.	60
Fig. 4.21. Local magnetic moments of Fe and Mn for fcc Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) with Fe/Mn ratio of 4 and 2.33.....	62

- Fig. 4.22. The shear moduli C' (a) and C_{44} (b) as function of concentration for fcc Fe-Mn and Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) with an addition of X up to 8 at.-% for Fe/Mn ratio = 4 and 2.33. 64
- Fig. 4.23. The calculated B/G ratio for fcc Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) with Fe/Mn ratio of 4 and 2.33 in comparison with B/G ratio of other fcc phases. 66
- Fig. 4.24. Phase evolution of thin films vs. a) Cr content, b) Co content, c) Ni content and d) Cu content for fcc Fe-Mn-X with a Fe/Mn ratio of 2.3. 68
- Fig. 4.25. Calculated (open circles) and experimentally determined (filled rectangles) lattice parameters for fcc Fe-Mn-X with a Fe/Mn ratio of 2.3, a) X = Cr, b) X = Co, c) X = Ni, d) X = Cu. 70
- Fig. 4.26. Calculated (open circles) and experimentally determined (filled rectangles) Young's modulus values for fcc Fe-Mn-X with a Fe/Mn ratio of 2.3, a) X = Cr, b) X = Co, c) X = Ni, d) X = Cu. 72

VI List of tables

Table 3.1. Experimental parameters applied for the thin film synthesis of Fe-Mn-C, Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) and Fe-Mn-Al alloys.	15
Table 4.1. Chemical composition of the bulk samples in at.-%.	29
Table 4.2. Chemical composition of the bulk samples in at.-%.	43
Table 4.3. <i>Ab initio</i> calculations of fcc Fe-Mn-Al alloys with a Fe/Mn ratio of 2.33.	50
Table 4.4. Chemical composition of the Fe-Mn-X (X = Cr, Co, Ni, Cu) thin films in at.-%.	67

VII Symbols and abbreviations

Symbol	Description
E_{xc}	Exchange-correlation energy
$\hat{H}$	Hamilton operator
$\hat{T}$	Kinetic energy
T_s	Non-interacting kinetic energy
$\hat{V}$	External potential
v_{ext}	External potential
$\hat{W}$	Electron-electron interaction
μ_{Fe}, μ_{Mn}	Local magnetic moment of Fe and Mn
a	Contact radius
$A(h_c)$	Contact area
a_0	Lattice parameter
B	Bulk modulus
$C', C_{11}, C_{12}, C_{44}$	Elastic constants
d	Atomic plane spacing

Symbol	Description
E	Young's modulus
E	Total energy
E_i	Young's modulus of the indenter
E_r	Reduced elastic modulus
G	Shear modulus
G_v	Shear modulus after Voigt
H	Hardness
h, k, l	Miller indices
h_c	Contact depth
h_t	Total depth
n	Integer of wavelength
$P_{\max}$	Maximum load
R	Radius of the indenter
R_q	Root mean square roughness
S	Stiffness
U	Hartree part of the electron-electron interaction

Symbol	Description
	energy
ϵ_{ind}	Indentation strain
θ	Diffraction angle
λ	Wavelength
ν	Poisson's ratio
ν_i	Poisson's ratio of the indenter
σ_{ind}	Indentation stress
ψ	Wave function
$\gamma\text{-Fe, } \alpha\text{-Fe, } \beta\text{-Mn}$	Crystalline structures

Abbreviation	Description
AFM	Antiferromagnetic
AFM	Atomic force microscopy
bcc	Body-centered-cubic
CI	Confidence Index

Abbreviation	Description
CPA	Coherent potential approximation
CSM	Continuous stiffness measurement
DC	Direct current
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DFT	Density functional theory
DLM	Disordered local moment
EBSD	Electron backscatter diffraction
EDS, EDX	Energy-dispersive X-ray spectroscopy
EMTO	Exact muffin tin orbitals
fcc	Face-centered-cubic
FCD	Full charge density
FEM	Finite element method
GADDS	General area detection diffraction system
GGA	Generalized gradient approximation
HPPMS	High power pulsed magnetron sputtering
HS	High-spin

Abbreviation	Description
ICCD	International Centre for Diffraction Data
ICSD	Inorganic Crystal Structure Database
JCPDS	Joint Committee on Powder Diffraction Standards
LS	Low-spin
LSDA	Local spin density approximation
LSGF	Locally self-consistent Green's function
NIST	National Institute of Standards
PBE	Perdew-Burke-Ernzerhof
PDF	Powder Diffraction File
PVD	Physical vapor deposition
SEM	Scanning electron microscopy
SFB	Collaborative research center
SFE	Stacking fault energy
SQS	Special quasi-random structure
SRO	Short-range order
TRIP	Transformation induced plasticity

Abbreviation	Description
TWIP	Twinning induced plasticity
VASP	Vienna <i>ab initio</i> simulation program
VEC	Valence electron concentration
WDS, WDX	Wavelength-dispersive X-ray spectroscopy
XRD	X-ray diffraction

VIII Acknowledgements

An erster Stelle danke ich Prof. Jochen M. Schneider für seine große Unterstützung und Motivation in den Jahren während meiner Promotion. Ich danke Dir nicht nur für die sehr gute Betreuung dieser Dissertation, sondern auch für Dein Mentoring während dieser Zeit. Darüber hinaus haben die von Dir geschaffenen Rahmenbedingungen am MCh meine Kreativität in diesem Forschungsprojekt gefördert und es hat mir sehr viel Freude gemacht, an Deinem Lehrstuhl zu arbeiten.

Ich danke Denis Music für viele sehr gute wissenschaftliche Diskussionen und Ratschläge. Mein nächster Dank geht an Tetsuya, Stano, Jens und Thomas, die mich unter anderem im Labor unterstützt haben. Farwah und Carolin danke ich für ganz tolles Teamwork in Frauenpower und die entstandene Freundschaft. Jie danke ich für den Beistand in unserem gemeinsamen Büro und die vielseitigen kulinarischen Ausflüge in die jeweils andere Kultur. Eine stetige Stütze im Labor waren die mechanische und elektrische Werkstatt, Herrn Horbach, Herrn Bomke, Stefan und Bernd, denen ich dafür danke. Ich danke meinen studentischen Hilfskräften Monika, Christian, Sebastian und Freio für die Hilfe bei der Durchführung von Experimenten und Analysen. Mein Dank geht auch an alle hier jetzt nicht namentlich genannten Kollegen am MCh für die Mithilfe und das Zusammenarbeiten in einer guten Atmosphäre.

Ich danke Prof. Igor Abrikosov und Marcus Ekholm, zwei Forschungsaufenthalte an der Universität Linköping möglich gemacht zu haben und für ihre gute Betreuung in Schweden mit vielen wissenschaftlichen Diskussionen und Berechnungen. Meinen Kollegen aus dem Sonderforschungsbereich SFB 761, insbesondere dessen Leiter

Prof. Wolfgang Bleck und Prof. Dierk Raabe, danke ich herzlich für die gute Zusammenarbeit.

Ude Hangen und Naoki Fujisawa von der Firma Hysitron danke ich für die Beratung bezüglich der Messungen mit unserem Nanoindenter.

Weiterhin möchte ich meinen Freunden und meiner Familie einen großen Dank aussprechen, die mich immer gefördert und ermutigt haben.

Besonders danken möchte ich meinem Mann Benjamin für seinen Rückhalt, Rat, Geduld und Liebe.