

# Einladung zur Ringvorlesung „Simulationswissenschaften“

Mittwoch, 8. November 2017, SWZ-Seminarraum 324 (C9), TU Clausthal, 16:15 Uhr

**Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann**  
**Simulationswissenschaftliches Zentrum**  
**Clausthal-Göttingen, TU Clausthal**

spricht über das Thema

## **Molekulardynamik-Simulationen von heterogenen Materialien unter hoher mechanischer Belastung**

### Inhalt des Vortrags:

Mit Hilfe von Molekulardynamik-Simulationen wird das Verhalten von heterogenen Materialien unter hoher mechanischer Belastung analysiert. Aufgrund der Komplexität der betrachteten Materialien existieren keine vollständigen analytischen Vorhersagen der Werkstoffantwort, sodass Computersimulationen ein nützliches Werkzeug sind, um die Materialeigenschaften bei mechanischer Beanspruchung zu analysieren. Als prototypisches Material wird polykristallines Eisen studiert, das eine druckinduzierte Phasenumwandlung von der kubisch-basiszentrierten zur hexagonal dichtest gepackten Struktur bei etwa 13 GPa zeigt. Es wird ein interatomares Wechselwirkungspotential verwendet, welches den Phasenübergang beim experimentell zu erwartenden Übergangsdruck modelliert. Die Simulationen zeigen, dass der Phasentransformation plastische Aktivität in der Form von Versetzungsbildung an den Korngrenzen vorausgeht, was als 3-Wellen-Struktur bezeichnet wird: Es wird eine elastische Kompressionswelle beobachtet, an die eine plastische Welle anschließt, die zuletzt zu einer Phasentransformationsfront führt.

Trotz großer Unterschiede in den Materialeigenschaften weisen Aluminium-Nanoschäume ebenfalls eine 3-Wellen-Struktur auf, die drei verschiedene Regimes kennzeichnet: Einem elastischen Vorläufer folgt plastische Aktivität in den Filamenten, bevor die Schaumstruktur letztendlich eingedrückt wird und ein kompaktifiziertes Material entsteht. Die Versetzungsbildung in den Filamenten kann veranschaulicht und mit dem Geschwindigkeitsprofil korreliert werden.

Dabei können Versetzungsstrukturen mit der Methode D2C charakterisiert werden, indem diskrete Versetzungslinien durch kontinuierliche Feldvariablen ausgedrückt werden. Am Beispiel von Molekulardynamik-Simulationen von Nanoritzen in Eisen wird in diesem Vortrag gezeigt, dass mittels D2C Eigenschaften der Versetzungsmikrostruktur ermittelt werden können, die nicht direkt aus den atomistischen Daten bestimmt werden können. So kann die Nukleationsrate von Versetzungsschleifen unter dem Indenter bestimmt werden, was als Input für Methoden auf der Mesoskala verwendet werden kann.

**Gäste sind herzlich willkommen. Im Anschluss an den Vortrag wird es ebenfalls im SWZ einen klein Imbiss geben, zu dem Sie ebenfalls herzlich eingeladen sind.**

Geschäftsstelle:  
Gebäude C9, Arnold-Sommerfeld-Straße 6  
38678 Clausthal-Zellerfeld

alexander.herzog@tu-clausthal.de  
Telefon: (0 53 23) 72-29 66  
Telefax: (0 53 23) 72-23 04

Das SWZ ist eine gemeinsame Forschungseinrichtung der Universitäten



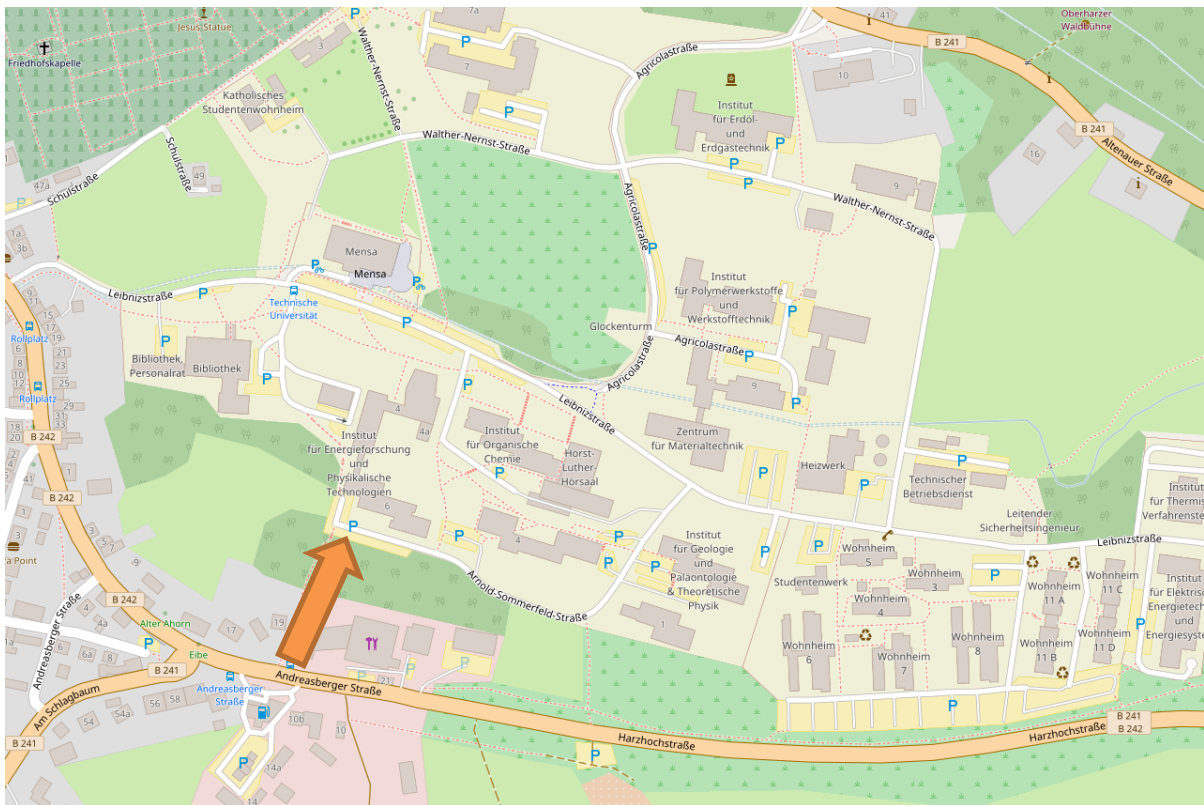
TU Clausthal



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT  
GÖTTINGEN

Der Vortrag findet in folgendem Gebäude statt:

**Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Clausthal-Göttingen  
Gebäude C9, Raum 324  
Arnold-Sommerfeld-Straße 6  
38678 Clausthal-Zellerfeld**



Navigation:  
[tu-c.de/c9](https://tu-c.de/c9)

