

Invitation to lecture series „Simulation Sciences“

Wednesday, November 8th, 2017, SWZ room 324 (C9), TU Clausthal, 4:15 pm

Jun.-Prof. Dr. Nina Gunkelmann
Simulation Science Center Clausthal-Göttingen,
Clausthal University of Technology

will talk about

Molekulardynamik-Simulationen von heterogenen Materialien unter hoher mechanischer Belastung

Content of the lecture:

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.

Guests are welcome. After the lecture, there will be a small snack at the SWZ, for which you are warm welcome.

Head office:
Building C9, Arnold-Sommerfeld-Straße 6
38678 Clausthal-Zellerfeld

alexander.herzog@tu-clausthal.de
Phone: +49 5323 72-29 66
Fax: +49 5323 72-23 04

The SWZ is a common interdisciplinary research facility in simulation science of



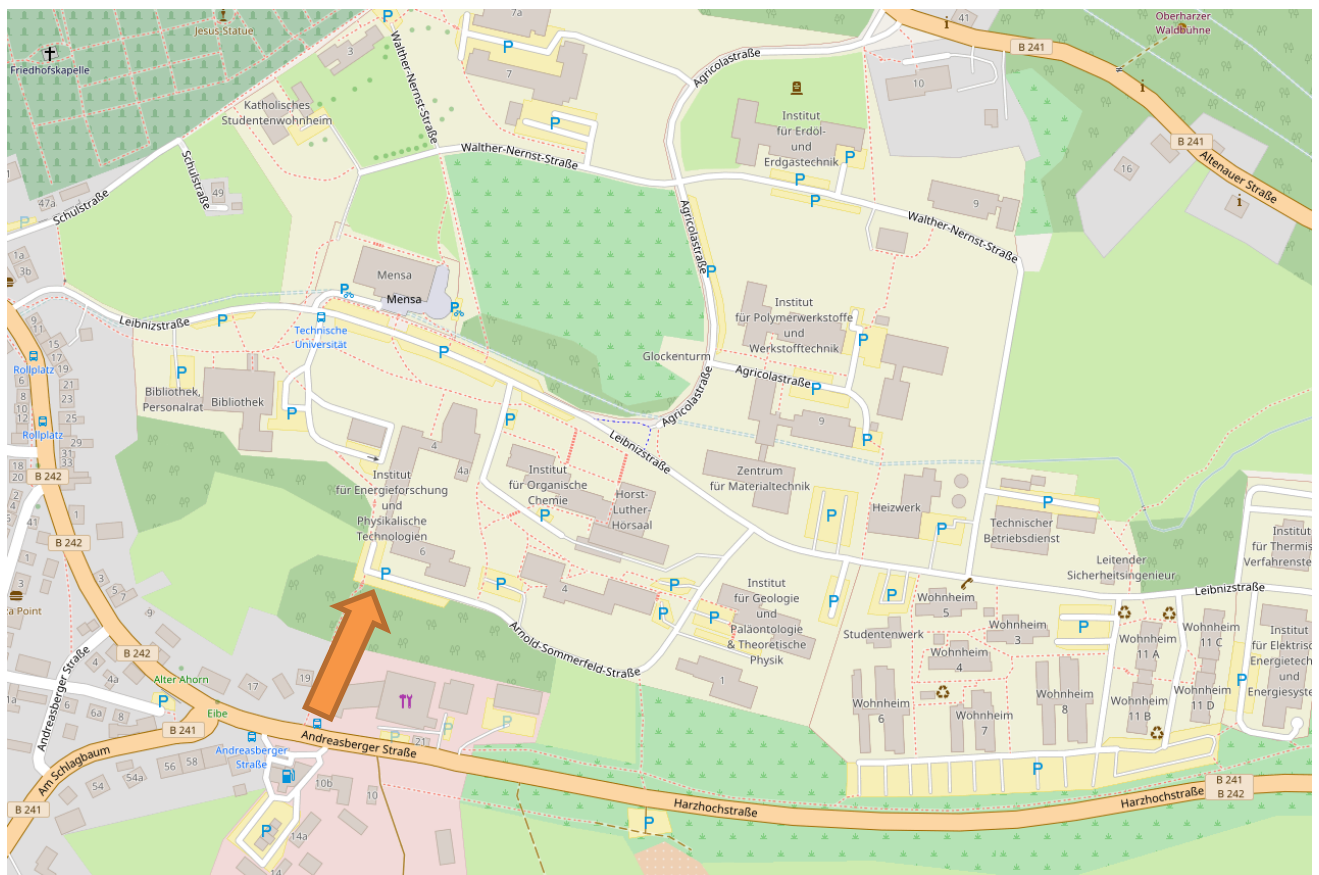
TU Clausthal



GEORG-AUGUST-UNIVERSITÄT
GÖTTINGEN

The lecture will be held in this building:

Simulation Science Center Clausthal-Göttingen
Building C9, Room 324
Arnold-Sommerfeld-Straße 6
38678 Clausthal-Zellerfeld



Navigation:
tu-c.de/c9

