



Sonderforschungsbereich 595 Elektrische Ermüdung in Funktionswerkstoffen



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT

Kolloquien im SOMMERSEMESTER 2008

10.04.
2008

Dr. Walter Wolf

Materials Design, Le Mans, France

Ab-initio Computersimulation komplexer Material- prozesse: von Defektbildung und Diffusion zu Phasendiagrammen und Phasenpräzipitation

Die Simulation komplexer Prozesse in Materialien erfordert das Zusammenwirken einer Vielzahl unterschiedlicher Methoden und Ansätze in einer leistungsfähigen computergestützten Umgebung.

Ein wesentlicher Beitrag, der über die rein elektronische Wechselwirkungsenergie hinausgeht, stammt von den atomaren Schwingungen. Die aus der Phononendispersion abgeleitete temperaturabhängige vibrationelle Enthalpie und Entropie sind durchaus in der Lage, reine ab initio Resultate ins Gegenteil zu verkehren. Dies wird anhand der Untergitterpräferenz von Wasserstoffdefekten in Metallen demonstriert. Auch die Diffusion von Defekten in Kristallgittern kann quantitativ beschrieben werden, wie für die Wasserstoffdiffusion in Nickel gezeigt wird. Die Berücksichtigung vibrationeller Terme erlaubt es auch, temperaturabhängige Phasenumwandlungen vorherzusagen, wie am Beispiel des Übergangs vom monoklinen zum tetragonalen Zirkonoxid demonstriert wird.

Zusätzlich zu den vibrationellen Anteilen führt auch die konfigurationelle Vielfalt zu wichtigen Beiträgen zur freien Energie eines Systems. Schon relativ einfache analytische Modelle erlauben es für geeigneten Systeme das vollständige Druck-Temperatur-Zusammensetzungs Phasendiagramm mit grosser Genauigkeit zu berechnen, was für das Yttrium-Wasserstoff System gezeigt wird. Kompliziertere Wechselwirkungen, wie etwa bei partiell ungeordneten Systemen, erfordern allerdings wesentlich aufwendigere Methoden. Dies wird anhand von Kinetischen Monte Carlo Simulationen der Phasenpräzipitation im Al-Li System auf Basis einer ab initio Clusterentwicklung vorgestellt.

Die Vorträge finden, wenn nicht anders angegeben, jeweils um **16:15**
im Gebäude der Materialwissenschaften, Lichtwiese, Petersenstr. 23, **Raum 77** statt