



INTERDISCIPLINARY CENTRE FOR
ADVANCED MATERIALS SIMULATION

Special Seminar

Prof. Herbert M. Urbassek

Universität Kaiserslautern, Fachbereich Physik

Wednesday, July 15th, 10 a.m.
ICAMS Seminar room UHW 11/1102

Atomistische Simulationen zu Festkörperphasenumwandlungen und Nanoindentierung

Das Bemühen, das mechanische und thermodynamische Verhalten von Festkörpern durch klassische Modelle zu verstehen, ist stark durch die Verfügbarkeit adäquater interatomarer Wechselwirkungspotentiale eingeschränkt. In diesem Vortrag soll dies anhand zweier typischer Anwendungsfelder demonstriert werden. In Falle der Nanoindentierung, bei der das elastische und plastische Verhalten studiert wird, können einige wenige relevante Materialparameter identifiziert werden; sind diese durch das Potential gut beschrieben, gelingt die Simulation realistisch. Festkörperphasenumwandlungen sind deutlich komplexer; hier wird anhand von Beispielen für das Material Eisen vorgestellt, welche Materialeigenschaften durch ein empirisches Mehrteilchenpotential in Hinblick auf Phasenumwandlungen beschrieben werden müssen und können.