

„Molekulardynamische Simulationen zum Einfluss von Ausscheidungen auf die Verformungslokalisierung in gealterten Al-Mg-Legierungen“, SCHM 746/146-1

Ziel des Projekts ist es, Prozesse, die auf atomarer Ebene die Verformungslokalisierung in Al-Mg-Legierungen bestimmen, mit Hilfe von MD-Simulationen zu untersuchen. Dazu gehören

- die Wechselwirkung von Versetzungen in Al mit gelösten Mg-Fremdatomen, Mg-Clustern und kleinen Al-Mg-Ausscheidungen,
- die Nukleation und Dynamik von Versetzungen an Oberflächen und vorhandenen Versetzungen bei plastischer Deformation unter statischer und zyklischer Beanspruchung von Al-Mg-Legierungen und
- die Auswirkung von Magnesium auf die mechanischen Eigenschaften von Al-Mg-Legierungen in verschiedenen Alterungszuständen.

Bei den MD-Simulationen sollen atomistische Konfigurationen von Al-Mg-Legierungen benutzt werden, über die bereits experimentelle Untersuchungen vorliegen. Die Simulationen sollen das Verständnis des PLC-Effektes und der Verformungsinhomogenitäten bei der Verformungslokalisierung auf nanoskaliger Ebene verbessern.