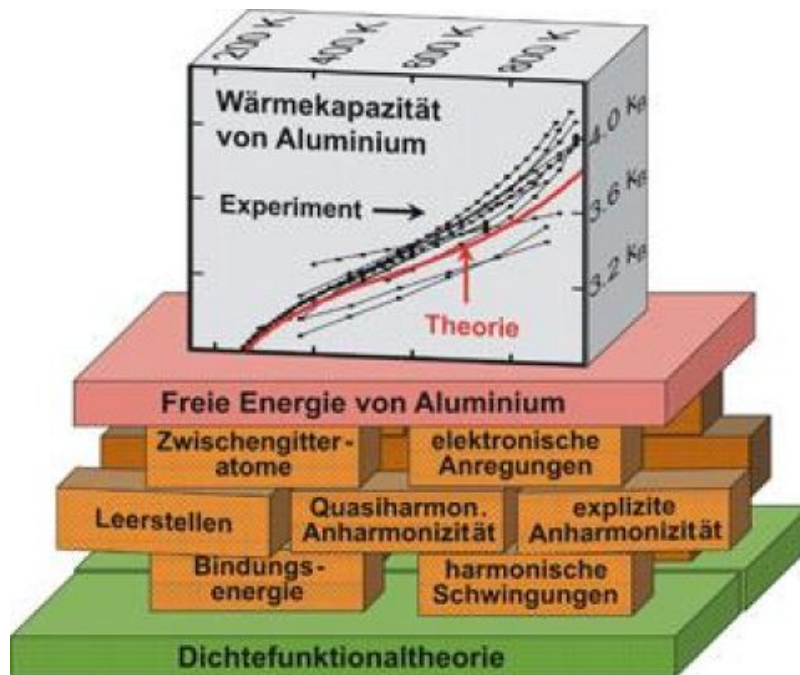


Materialien unter Extrembedingungen

04.05.2009, 09:10 | Wissenschaft, Forschung, Bildung

Pressemitteilung von: *Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH*



Mechanismen, die die Wärmekapazität von Al bestimmen und mit den neuen Methoden am MPIE mit hoher Genauigkeit bestimmt wurden.

Neuartige, am Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH (MPIE) entwickelte Computersimulationstechniken, ermöglichten die Lösung eines der ältesten Probleme in der modernen Festkörperphysik. Dieses Problem, welches erstmals von Einstein kurz nach seinem berühmten Jahr 1905 (annus mirabilis) formuliert wurde, beinhaltet eine auf den ersten Blick simple Fragestellung: Wie wird die Energie bei kontinuierlicher Wärmezufuhr im Festkörper gespeichert und welche Mechanismen sind letztendlich für die Aufweichung des kristallinen Gitters und damit für das Versagen des Materials verantwortlich? Diese Frage, 1921 von einem weiteren Nobelpreisträger (Max Born) aufgegriffen, konnte jedoch weder von ihm noch von einer Vielzahl weiterer Forscher auf Grund der Unmöglichkeit, genaue Messungen der Wärmekapazität in der Nähe des Schmelzpunktes durchzuführen (siehe Abb.), beantwortet werden. Durch die Zusammenführung von zwei wichtigen Disziplinen der Physik, der Quantenmechanik und der Thermodynamik, gelang es einem jungen Forscherteam in der Abteilung Computergestütztes Materialdesign (CM) am MPIE, das experimentelle Labor quasi auf den Rechner zu holen und damit dieses Rätsel für eines der am häufigsten untersuchten Systeme, einkristallines Aluminium, zu lösen. In der am 13.04.2009 veröffentlichten Analyse (1) wiesen die Wissenschaftler nach, dass erst ein bislang nicht vermutetes Zusammenspiel bisher einzeln und äußerst kontrovers diskutierter Mechanismen die Eigenschaften von Festkörpern bei extrem hohen Temperaturen bestimmt. Dies ist ein wichtiger Durchbruch, um künftig experimentell nicht zugängliche Materialeigenschaften direkt auf dem Computer zu bestimmen(2).

1

B. Grabowski, L. Ismer, T. Hickel und J. Neugebauer: Ab initio up to the melting point: Anharmonicity and vacancies in aluminium, *Physical Review B* 79, 134106 (2009).

2

Eine allgemeinverständliche Besprechung des Artikels findet sich unter:

G. Grimvall: Turn off the lab furnace and boot up the mainframe, *Physics* 2, 28 (2009).

frei erhältlich unter: <http://link.aps.org/doi/10.1103/Physics.2.28>

Portrait

Am Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH (MPIE) wird Forschung auf dem Gebiet von Eisen, Stahl und verwandten Werkstoffen wie Nickel, Titan und intermetallische Phasenlegierungen betrieben. Ein wesentliches Ziel der Untersuchungen ist ein verbessertes Verständnis der komplexen physikalischen Prozesse und chemischen Reaktionen dieser Werkstoffe. Außerdem werden neue Hochleistungswerkstoffe mit ausgezeichneten physikalischen und mechanischen Eigenschaften für den Einsatz als high-tech Struktur- und Funktionsbauteile entwickelt. Auf diese Weise verbinden sich erkenntnisorientierte Grundlagenforschung mit innovativen, anwendungsrelevanten Entwicklungen und Prozesstechnologien. Das Max-Planck-Institut für Eisenforschung GmbH wird zu gleichen Teilen von der Max-Planck-Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften e.V. und dem Stahlinstitut VDEh finanziert. Das Institut ist in vier Abteilungen gegliedert:

Computer-Gestütztes Material-Design
Grenzflächenchemie und Oberflächentechnik
Mikrostrukturphysik und Umformtechnik
Werkstoffdiagnostik und Technologie der Stähle

Die Abteilungen sind in Arbeitsgruppen mit spezifischen Forschungsaktivitäten unterteilt. Diese ergänzen sich und tragen gemeinsam zum Erreichen der Abteilungsziele bei. Neben den Forschungsschwerpunkten der einzelnen Abteilungen werden abteilungsübergreifende Forschungsfelder gemeinsam verfolgt, um in einer konzertierten Initiative wissenschaftlichen und technischen Zielen zum Durchbruch zu verhelfen. Diese interdisziplinäre Bearbeitung von Forschungsthemen hat besondere Bedeutung in Hinblick auf die wissenschaftlichen und technischen Herausforderungen in hochaktuellen, von starkem Wettbewerb geprägten Forschungsgebieten. Zu diesen gehören die Entwicklung neuer Stähle mit besonderen Materialeigenschaften, die Untersuchung von Oberflächen- und Grenzflächenstabilitäten, die Erforschung des Zusammenhanges zwischen Mikrostruktur und Werkstoffeigenschaften, die Entwicklung neuartiger experimenteller Methoden zur Werkstoffcharakterisierung und einer neuen Generation von computergestützten Simulationswerkzeugen, die auf quantenmechanischen Multiskalenmethoden basieren.

News-ID: 306673 • Views: 1226 (Stand: 23.05.2026)

Link zur Pressemitteilung:

<https://www.openpr.de/news/306673/Materialien-unter-Extrembedingungen.html>