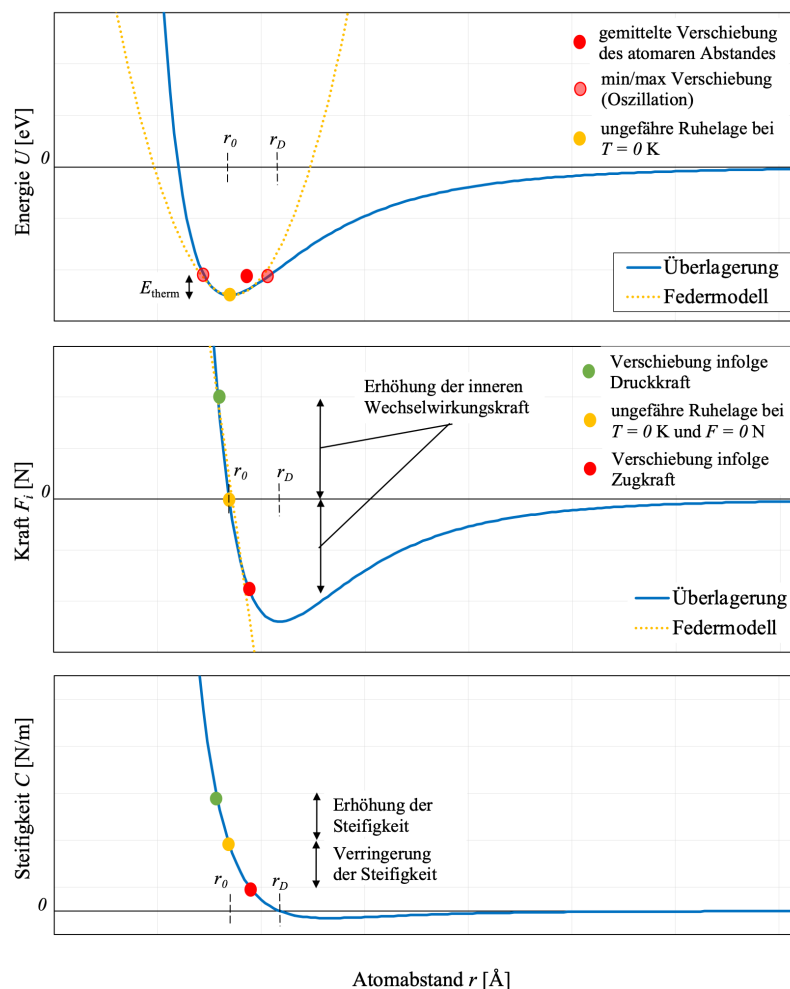


Thematik: Atomare Wechselwirkung LAMMPS
Teilbereich: Metallkunde / Technische Physik
Geeignet als: Masterarbeit
Ansprechpartner: Dr.-Ing. Daniel Sahm



Kurzbeschreibung

Die Abschlussarbeit widmet sich der Simulation des Einflusses von thermischer Energie auf die atomare Wechselwirkung und die daraus ableitbaren Größen (z. B. Elastizitätsmodul) innerhalb einer metallischen Struktur unter Verwendung des LAMMPS Molecular Dynamics Simulators. Die atomare Wechselwirkung ist ein grundlegender Aspekt in der Materialwissenschaft und spielt eine entscheidende Rolle bei der Bestimmung der Struktur, Dynamik und mechanischen Eigenschaften von Metallmaterialien.



Das Hauptziel dieser Arbeit besteht darin, mithilfe von LAMMPS, einer leistungsstarken Molecular Dynamics Simulationssoftware, die thermische Energie auf das Verhalten von Atomen einer metallischen Struktur zu untersuchen. Dabei sollen die atomaren Kräfte und Potenziale unter Berücksichtigung der thermischen Effekte modelliert werden, um das Verhalten der Atome bei unterschiedlichen Temperaturen zu simulieren. Durch die Anwendung der Molecular Dynamics Simulation können verschiedene Größen, wie die Ausdehnung, die Schwingungsfrequenzen, die Gitterfehler und die Diffusionsprozesse, analysiert und quantifiziert werden. Weiterhin ermöglicht die Simulation auch Einblicke in Phasenübergänge, Kristalldefekte und die Verteilung der atomaren Energien innerhalb der Strukturen.

Die gewonnenen Erkenntnisse dieser Abschlussarbeit sollen einen Einblick über des thermischen Verhaltens von metallischen Materialien auf atomarer Ebene geben. Die Simulation des Einflusses der thermischen Energie kann dazu beitragen, die thermischen Eigenschaften von Metallen besser zu charakterisieren und die Materialentwicklung für Hochtemperaturanwendungen oder spezielle Einsatzbedingungen zu optimieren.